微扰与散射理论简介

#Quantum_Field_Theory

1. Dirac 绘景 (相互作用绘景)

1.1 背景回顾

众所周知，在 Schrödinger 绘景中，可观测量本身不演化，态矢本身演化。态矢的时间演化由时间演化算符 $U(t,t')$ 描述：

$$|\psi(t)\rangle_S = U(t,t')|\psi(t')\rangle_S$$

时间演化算符显然具有以下性质：

1. 幺正性：$U^\dagger(t,t') = U(t',t)$，且 $U(t,t') = U^{-1}(t',t)$。
2. 群性质：$U(t,t')U(t',t'') = U(t,t'')$。
3. 恒等性：$U(t',t') = 1$。

时间演化算符服从 Schrödinger 方程：

$$i\frac{\partial}{\partial t}U(t,t') = H(p_S,q_S,t)\cdot U(t,t')$$

若哈密顿量不含时，则演化算符可写为：

$$U(t,t') = \exp(-iH(p_S,q_S)(t-t'))$$

在 Heisenberg 绘景中，可观测量随时间演化，态矢不演化。为了使两绘景下观测量的期望值相同，算符变换关系为：

$$A_H(t) = U^\dagger(t,0)A_S(t)U(t,0)$$

特别地，若哈密顿量不含时，$H_H(t) = H_S(t)$，即哈密顿量在 Heisenberg 绘景下不演化。

1.2 相互作用绘景定义

接下来考虑相互作用绘景（或称 Dirac 绘景）。我们将哈密顿量拆分为自由部分和相互作用部分：

$$H = H_0(p,q) + H_I(p,q,t)$$

如下定义相互作用绘景中的态矢与算符：

$$|\psi(t)\rangle_I = \exp(iH_0(p_S,q_S)t)\cdot|\psi(t)\rangle_S$$
$$A_I(t) = \exp(iH_0(p_S,q_S)t)A_S(t)\exp(-iH_0(p_S,q_S)t)$$

在这样的定义下，必有期望值不变：

$${}_I\langle\psi(t)|A_I(t)|\psi(t)\rangle_I = {}_S\langle\psi(t)|A_S(t)|\psi(t)\rangle_S$$

此定义的目的在于消除态矢中由 H_0 引起的快速演化，仅保留微扰部分 H_I 对态矢演化的控制。

1.3 运动方程推导

但是，这样的变换并没有完全消除态矢的演化。我们对变换后的态矢求时间导数：

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle_I &= \frac{d}{dt}(\exp(iH_0(p_S,q_S)t)\cdot|\psi(t)\rangle_S)\\ &= (iH_0(p_S,q_S))\exp(iH_0(p_S,q_S)t)|\psi(t)\rangle_S + \exp(iH_0(p_S,q_S)t)\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle_S\end{aligned}$$

利用 Schrödinger 方程 $i\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle_S = (H_0+H_I)|\psi(t)\rangle_S$，代入上式第二项：

$$
\begin{aligned}
&= (iH_0)\exp(iH_0t)|\psi(t)\rangle_S + \exp(iH_0t)\cdot(-iH_0 - iH_I(p_S,q_S,t))|\psi(t)\rangle_S \\
&= \exp(iH_0t)(-iH_I(p_S,q_S,t))\exp(-iH_0t)\cdot[\exp(iH_0t)|\psi(t)\rangle_S] \\
&= -iH_I(p_I,q_I,t)|\psi(t)\rangle_I
\end{aligned}
$$

其中 $H_I(p_I,q_I,t)$ 为相互作用绘景下的哈密顿量（即相互作用项变换到相互作用绘景）。整理得相互作用绘景下的运动方程：

$$
i\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle_I = H_I(t)|\psi(t)\rangle_I
$$

1.4 演化算符与编时算符

设相互作用绘景中有演化算符 $U_I(t,t')$，则它显然满足与 Schrödinger 绘景中演化算符形式类似的方程：

$$
i\frac{\partial}{\partial t}U_I(t,t') = H_I(p_I,q_I,t)\cdot U_I(t,t')
$$

我们可以通过对比 Schrödinger 绘景中的演化算符来寻找 U_I 的表达式。已知：

$$
|\psi(t)\rangle_I = U_I(t,0)|\psi(0)\rangle_I = \exp(iH_0t)\cdot|\psi(t)\rangle_S
$$
$$
|\psi(t)\rangle_S = U(t,0)|\psi(0)\rangle_S
$$

而在 $t=0$ 时，$|\psi(0)\rangle_I = |\psi(0)\rangle_S$。因此：

$$
\exp(-iH_0t)\cdot U_I(t,0) = U(t,0) \implies U_I(t,0) = \exp(iH_0t)U(t,0)
$$

通过迭代求解该微分方程，其形式解为：

$$
U_I(t,t') = T\exp\left(-i\int_{t'}^{t} H_I(t'')dt''\right)
$$

这里的 T 是编时算符 (Time-ordering operator)，它的作用是对算符进行时间排序。其定义为：

$$
T(A_1(t_1)A_2(t_2)\cdots A_n(t_n)) = A_{j_1}(t_{j_1})A_{j_2}(t_{j_2})\cdots A_{j_n}(t_{j_n})
$$

其中 $t_{j_1} > t_{j_2} > \cdots > t_{j_n}$。即时间更早的算符被排在右侧。

为了验证该形式解确实满足运动方程，我们对其求时间导数：

$$
\frac{dU_I(t,t')}{dt} = T\left(-iH_I(t)\exp\left(-i\int_{t'}^{t} H_I(t'')dt''\right)\right)
$$

由于 t 是所有积分时间中最晚的，根据编时算符的定义，自然可将其从编时符号中拉出，放在最左侧：

$$
\Rightarrow \frac{dU_I(t,t')}{dt} = -iH_I(t)\cdot T\exp\left(-i\int_{t'}^{t} H_I(t'')dt''\right) = -iH_I(t)U_I(t,t')
$$

从而验证了上面的形式解确实是演化方程的解。若不加编时符号，由于不同时间上的 H_I 不对易，从而不能推出上述 $\frac{dU_I}{dt}$ 的形式。

2. 散射理论与 S 矩阵 (Scattering and S-Matrix)

2.1 物理图像与渐近态

考虑一个非相对论哈密顿量 $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$。设无穷远处势场趋于零，即 $V(x)\to 0$。

我们设有两个态矢：一个按自由哈密顿量 $H_0 = \frac{p^2}{2m}$ 演化，另一个按完整相互作用哈密顿量 H 演化。

$$
\begin{cases}
|\psi(t)\rangle = \exp(-iH_0(t-t'))|\psi(t')\rangle \\
|\psi(t)\rangle^{in} = \exp(-iH(t-t'))|\psi(t')\rangle^{in}
\end{cases}
$$

我们要求态 $|\psi(t)\rangle$ 和 $|\psi(t)\rangle^{in}$ 在无穷远过去是渐近相同的。从而有渐近条件：

$$
\lim_{t\to-\infty} ||\exp(-iH_0t)|\psi\rangle - \exp(-iHt)|\psi\rangle^{in}|| = 0
$$

这个式子可以理解为 $\exp(iH_0\infty)|\psi\rangle$ 与 $\exp(iH\infty)|\psi\rangle^{in}$ 间有无穷小的差距。$\exp(iH_0\infty)$ 与 $\exp(iH\infty)$ 都是反向、向无穷远过去的演化算符。

相似地，我们要求 $|\phi(t)\rangle$ 与 $|\phi(t)\rangle^{out}$ 在无穷远未来一致：

$$\lim_{t\to+\infty}||\exp(-iH_0t)|\phi\rangle-\exp(-iHt)|\phi\rangle^{out}||=0$$

2.2 S 矩阵定义

S 矩阵定义为一个时间演化矩阵，它负责将无穷远过去的入射渐近态 $|\psi\rangle^{in}$ 映射为无穷远未来的出射渐近态 $|\psi\rangle^{out}$。其矩阵元定义为：

$$\langle\phi|S|\psi\rangle={}^{out}\langle\phi|\psi\rangle^{in}$$

作为时间演化算符，S 矩阵显然具有幺正性：

$$SS^\dagger=S^\dagger S=1$$

特别地，若 H 不含时，则 $[S,H_0]=0$。这是由于在 H 不含时，系统能量守恒。

推导如下：

$$\text{初始：}\langle\psi|H_0|\psi\rangle\quad\Rightarrow\quad\text{终末：}\langle\psi|S^\dagger H_0S|\psi\rangle$$

$$\Longrightarrow\ H_0=S^\dagger H_0S\ \Longrightarrow\ [S,H_0]=0$$

2.3 多粒子情形备注

对于多粒子的情形，例如 (1, 2) 粒子间可以有束缚态，则入态、出态可以用 (自由) $|\vec{p}_1,\vec{p}_2,\vec{p}_3\rangle^{in,out}$ 或 (束缚) $|\vec{P},\vec{p}_3\rangle^{in,out}$ 描写。

但它们对应的“自由”哈密顿量 H_0 不同：

- (自由) $H_0=\sum\frac{\vec{p}_i^2}{2m_i}$
- (束缚) $H_0=\frac{p^2}{2\mu}+\frac{p_3^2}{2m}+V_{12}(\vec{r})+\frac{P_{CM}^2}{4m}$ （注：此处 $\frac{P_{CM}^2}{4m}$ 隐含了粒子 1、2 质量均为 m 的假设，此时 $M_{12}=2m$）

你可以认为，$|\vec{p}_1,\vec{p}_2,\vec{p}_3\rangle^{in,out}$ 和 $|\vec{P},\vec{p}_3\rangle^{in,out}$ 是从完整哈密顿量 $H=\sum\frac{p_i^2}{2m}+V_{12}+V_{23}+V_{31}$ 的某初态向无穷远过去/未来演化得到的。由于它们对应于完整哈密顿量 H 的不同本征态（束缚态对应离散谱，散射态对应连续谱），根据厄米算符性质，它们彼此正交（时间演化算符是幺正算符，不影响正交性质）。

3. S 矩阵与演化算符的联系

3.1 绝热近似

我们将使用绝热近似，假设相互作用在一段时间 T 内维持，开启/关闭相互作用用时 Δ。从而哈密顿量写为：

$$H(t)=H_0+H_{int}(t)\to H_0+f(t,T,\Delta)H_{int}$$

3.2 最终结论

根据 S 算符的定义，我们可以找到 $|\psi\rangle$ 与 $|\psi\rangle^{in}$，$|\psi\rangle$ 与 $|\psi\rangle^{out}$ 的联系。

对于入态：

$$|\psi\rangle^{in}=\lim_{t'\to-\infty}\exp(iHt')\exp(-iH_0t')|\psi\rangle=\lim_{t'\to-\infty}U_I(0,t')|\psi\rangle$$

（物理意义：用 H_0 反向演化到无穷远过去，再用 H 正向演化到 0）。

对于出态：

$$|\psi\rangle^{out}=\lim_{t''\to+\infty}\exp(iHt'')\exp(-iH_0t'')|\psi\rangle=\lim_{t''\to+\infty}U_I(0,t'')|\psi\rangle$$

（物理意义：用 H_0 正向演化到无穷远未来，再用 H 反向演化到 0）。

最终 S 矩阵可表示为：

$$S = \lim_{\substack{T\to\infty \\ \Delta\to\infty \\ \Delta/T\to 0}} U_I(\infty, -\infty)$$

这说明 S 矩阵就是相互作用绘景下从 $-\infty$ 到 $+\infty$ 的时间演化算符。