練習問題 0.1: Griffith Problem10.21 Neutron diffraction

結晶による中性子散乱を考える．中性子と原子核の相互作用は短距離で,

$$V(\boldsymbol{r}) = \frac{2\pi\hbar^2 b}{m}\sum_i \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i) \tag{0.0.1}$$

と近似されるとする．ここで，$\boldsymbol{r}_i$ は i 番目の原子核の位置である．b は nuclear scattering length である．

1. 第 1Born 近似により散乱断面積は

$$\sigma = b^2\left|\sum_i \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_i}\right|^2 \tag{0.0.2}$$

となることを示せ．ここで，$\boldsymbol{q}\equiv\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}$，$\boldsymbol{k}$ は入射波，$\boldsymbol{k}'$ は散乱波とする．

2. 原子核が間隔 a の格子状で並んでいるとし,

$$\boldsymbol{r}_i = la\boldsymbol{e}_x + ma\boldsymbol{e}_y + na\boldsymbol{e}_z \tag{0.0.3}$$

とする．ここで l,m,n は 0 から $N-1$ の整数である．

$$\sigma = b^2\Pi_{i=x,y,z}\frac{\sin^2(Nq_ia/2)}{\sin^2(q_ia/2)} \tag{0.0.4}$$

となることを示せ.

3.

$$\frac{1}{N}\frac{\sin^2(Nq_xa/2)}{\sin^2(q_xa/2)} \tag{0.0.5}$$

を $N=1,5,10$ について横軸を q_xa としたグラフを図示せよ.

---

1. 散乱振幅を計算する.

$$\begin{aligned}
f^{(1)}(\theta) &= -\frac{1}{4\pi}\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}'}\frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{2\pi\hbar^2 b}{m}\sum_i\delta(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}')\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'}\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}' && (0.0.6)\\
&= -b\sum_i\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}'}\delta(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}_i)\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}' && (0.0.7)\\
&= -b\sum_i \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_i} && (0.0.8)
\end{aligned}$$

よって散乱断面積は

$$\sigma = \left|f^{(1)}(\theta)\right|^2 = b^2\left|\sum_i \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_i}\right|^2 \tag{0.0.9}$$

である.

2.

$$\begin{aligned}
\sum_i \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_i} &= \sum_{l=0}^{N-1}\sum_{m=0}^{N-1}\sum_{n=0}^{N-1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(laq_x+maq_y+naq_z)} && (0.0.10)\\
&= \sum_{l=0}^{N-1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}laq_x}\sum_{m=0}^{N-1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}maq_y}\sum_{n=0}^{N-1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}naq_z} && (0.0.11)
\end{aligned}$$

$$= \Pi_{i=x,y,z}\frac{1-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Naq_i}}{1-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}aq_i}} \tag{0.0.12}$$
$$= \Pi_{i=x,y,z}\frac{\sin(Nq_ia/2)}{\sin(q_ia/2)} \tag{0.0.13}$$

よって，

$$\sigma = b^2\Pi_{i=x,y,z}\frac{\sin^2(Nq_ia/2)}{\sin^2(q_ia/2)} \tag{0.0.14}$$

が得られる．

3. 散乱パターンは下図のようになる．

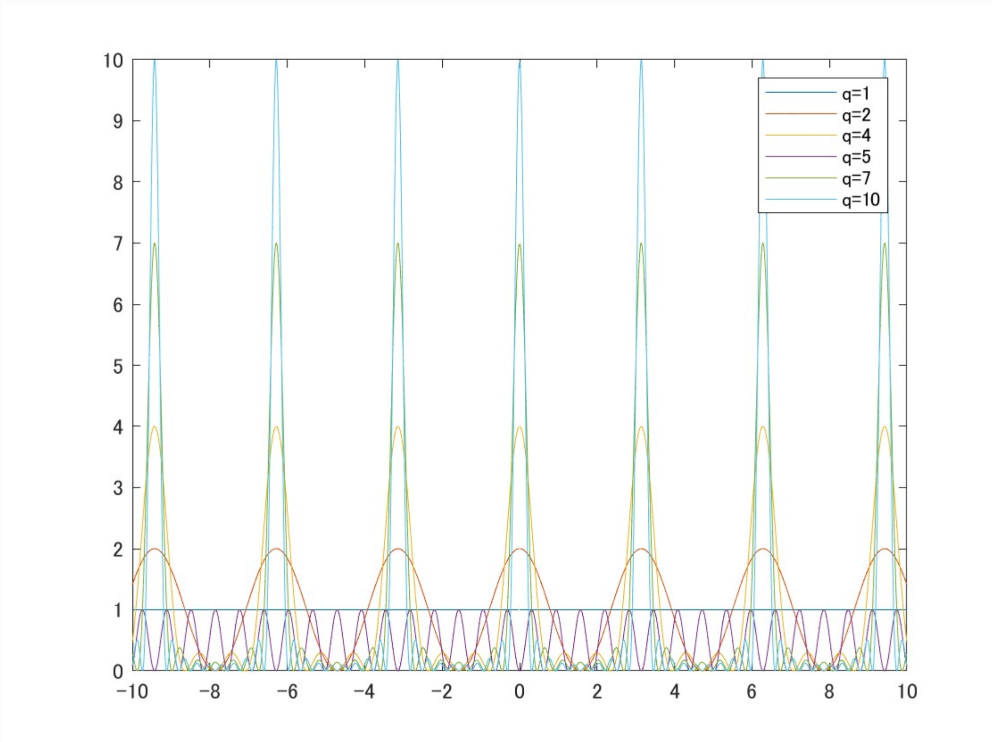

図 1: 散乱パターン

練習問題 0.2: Griffith Problem10.22 2 次元散乱理論

2 次元の散乱を考える．

1. 極座標ラプラシアン

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} \tag{0.0.15}$$

を用いてポテンシャル $V(r)$ の下での波動関数を求めよ．ここで $u(r) = \sqrt{r}R(r)$ が

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{(j^2-1/4)}{r^2}\right]u = Eu \tag{0.0.16}$$

を満たすことを用いてよい．j は整数である．

2. r が十分大きいときの**式** (0.0.16) を考えることにより，

$$R(r) \sim \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{\sqrt{r}} \tag{0.0.17}$$

であることを示せ．ここで，$k \equiv \sqrt{2mE}/\hbar$ である．

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right]\psi(r,\theta) = E\psi(r,\theta) \tag{0.0.18}$$

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\right) + V(r)\right]\psi(r,\theta) = E\psi(r,\theta) \tag{0.0.19}$$

$\psi(r,\theta) = R(r)\Theta(\theta)$ とし，上式を整理すると

$$\frac{r^2}{R(r)}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}R(r)\right) - \frac{r}{R(r)}\left(\frac{\partial}{\partial r}R(r)\right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}(V(r) - E) - \frac{1}{\Theta(\theta)}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\Theta(\theta) = 0 \tag{0.0.20}$$

となる．

$$-\frac{1}{\Theta(\theta)}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\Theta(\theta) = j^2 \tag{0.0.21}$$

とすれば

$$\Theta(\theta) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}j\theta} \tag{0.0.22}$$

が得られる．さらに，

$$\Theta(\theta) = \Theta(\theta + 2\pi) \tag{0.0.23}$$

だから j は整数であることがわかる．よって r に関する部分は

$$\frac{r^2}{R(r)}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}R(r)\right) - \frac{r}{R(r)}\left(\frac{\partial}{\partial r}R(r)\right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}(V(r) - E) = -j^2 \tag{0.0.24}$$

である．整理すると

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2}R(r) - \frac{\hbar^2}{2mr}\frac{\partial}{\partial r}R(r) + (V(r) - E)R(r) + \frac{\hbar^2 j^2}{2mr^2}R(r) = 0 \tag{0.0.25}$$

である．これは**式** (0.0.16) に $u = \sqrt{r}R$ を代入した式と同一である．よって波動関数は

$$\psi(r,\theta) = R(r)\mathrm{e}^{\mathrm{i}j\theta} \tag{0.0.26}$$

と表されることがわかる．ただし，j は整数，$u = \sqrt{r}R$ が

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{(j^2 - 1/4)}{r^2}\right]u = Eu \tag{0.0.27}$$

を満たすとする．
式 (0.0.16) で $r \to \infty$ とすれば

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}u^2} = Eu \tag{0.0.28}$$

であるため，

$$R(r) = \frac{u}{\sqrt{r}} = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{\sqrt{r}} \tag{0.0.29}$$

であることがわかる．
以上の結果は 2 次元の散乱問題の境界条件が

$$\psi(r,\theta) \simeq \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + f(\theta)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{\sqrt{r}},\ \text{for } r \to \infty \tag{0.0.30}$$

であることを示唆している．また，2 次元の部分波展開は Hankel 関数 $H^{(1)}$ を用いて，

$$\psi(r,\theta) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + \sum_j c_j H_j^{(1)}(kr)\mathrm{e}^{\mathrm{i}j\theta} \tag{0.0.31}$$

となる．

練習問題 0.3: Griffith example11.2

Fermi の黄金律を用いてポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ に対する散乱断面積を求めよ．

初期状態と終状態はそれぞれ入射波と散乱波であるため

$$\psi_i = \frac{1}{\sqrt{L^3}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{0.0.32}$$

$$\psi_f = \frac{1}{\sqrt{L^3}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}} \tag{0.0.33}$$

と表される．ここで，規格化のために周期 L の周期的境界条件を課した．また，この周期的境界条件により，

$$\boldsymbol{k}' = \frac{2\pi}{L}(n_x\boldsymbol{e}_x + n_y\boldsymbol{e}_y + n_z\boldsymbol{e}_z) \tag{0.0.34}$$

が得られる．n_x, n_y, n_z は整数である．散乱体のポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ を摂動として取り入れると

$$\langle f|\,\hat{V}\,|i\rangle = \int \psi_f^* V(\boldsymbol{r})\psi_i \,\mathrm{d}\boldsymbol{r} = \frac{1}{L^3}\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}}V(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{0.0.35}$$

を得る．
次に，状態密度を決定する．エネルギーが $[E, E+\mathrm{d}E]$ の状態は，厚さ k，立体角 $\mathrm{d}\Omega$ の球殻の中に

$$\frac{k^2\,\mathrm{d}k\,\mathrm{d}\Omega}{(2\pi/L)^3} \tag{0.0.36}$$

個含まれている．よって，

$$\rho(E)\,\mathrm{d}E = \frac{k^2\,\mathrm{d}k\,\mathrm{d}\Omega}{(2\pi/L)^3} = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 k^2\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}E}\,\mathrm{d}E\,\mathrm{d}\Omega \tag{0.0.37}$$

$E = \dfrac{\hbar^2k^2}{2m}$ なので，

$$\rho(E) = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3\frac{\sqrt{2m^3E}}{\hbar^3}\,\mathrm{d}\Omega \tag{0.0.38}$$

が得られる．よって，Fermi の黄金律から，単位時間に立体角 $\mathrm{d}\Omega$ に粒子が到達する確率は

$$\omega_{i\to\mathrm{d}\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{1}{L^6}\left|\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}}V(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}\right|^2\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3\frac{\sqrt{2m^3E_f}}{\hbar^3}\,\mathrm{d}\Omega \tag{0.0.39}$$

である．さらに，

$$\sigma\,\mathrm{d}\Omega = \frac{(\text{単位時間に立体角 }\mathrm{d}\Omega\text{ に粒子が到達する確率})}{(\text{単位時間単位面積当たりに粒子が入射する確率})} \tag{0.0.40}$$

であり，分子は入射波の確率の流れである．これは

$$J = \frac{1}{L^3}\frac{\hbar k}{m} \tag{0.0.41}$$

である．以上より，散乱断面積

$$\sigma = \frac{\omega_{i\to\mathrm{d}\Omega}}{J\,\mathrm{d}\Omega} = \left| -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}} V(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} \right|^2 \tag{0.0.42}$$

が得られる．これは第 1Born 近似で得られた式と同一である．