本節では量子力学的に散乱を議論する．量子力学では波動関数を用いて散乱体の様子を調べる．まず，散乱帯のポテンシャルを紹介して，散乱振幅 $f(\theta)$ を求めればいいことを知る．次に，散乱振幅と微分断面積の関係を調べる．最後に，具体的に散乱振幅の表式を導く．

0.0.1　散乱振幅

散乱体が球対称ポテンシャル $V(r)$ を持つとする．Schrödinger 方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2+V(r)\right)\psi(\boldsymbol{r})=E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{0.0.1}$$

である．ここで，$V(r)$ は $r\to\infty$ で r^{-1} より早く $V\to 0$ となるとする．なお，$r\to\infty$ で r^{-1} より早く 0 に収束することを，十分早く収束するということにする．z 軸に沿う入射波は平面波なので，

$$\psi_{\mathrm{in}}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}\ (z\to\infty) \tag{0.0.2}$$

と表せる．また，散乱波は外向きの球面波となるので，

$$\psi_{\mathrm{sc}}\simeq\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}\ (r\to\infty) \tag{0.0.3}$$

である．散乱問題とは，$r\to\infty$ で

$$\psi(\boldsymbol{r})=\psi_{\mathrm{in}}+\psi_{\mathrm{sc}} \tag{0.0.4}$$

$$=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}+f(\theta)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \tag{0.0.5}$$

を満たす**式** (0.0.1) の定常解を求めることである．$f(\theta)$ を散乱振幅という．上式は重要なので強調しておく．

散乱問題の境界条件

$$\psi(\boldsymbol{r})=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}+f(\theta)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \tag{0.0.6}$$

0.0.2　散乱振幅と微分断面積の関係

この問題を解くための準備として確率密度 $\rho:=\psi^*\psi$ の時間変化を考える．時間変化する Schrödinger 方程式より，

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi \tag{0.0.7}$$

$$\Leftrightarrow\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\hat{H}\psi \tag{0.0.8}$$

$$\Leftrightarrow\frac{\partial\psi^*}{\partial t}=-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\hat{H}\psi^* \tag{0.0.9}$$

であることを用いると，

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho=\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) \tag{0.0.10}$$

$$=\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi+\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{0.0.11}$$

$$=-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2+V\right)\psi^*\right]\psi+\psi^*\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2+V\right)\psi\right] \tag{0.0.12}$$

$$=\frac{\hbar}{2\mathrm{i}m}\left[\left(\boldsymbol{\nabla}^2\psi^*\right)\psi-\psi^*\left(\boldsymbol{\nabla}^2\psi\right)\right] \tag{0.0.13}$$

$$=-\frac{\hbar}{2\mathrm{i}m}\boldsymbol{\nabla}\cdot(\psi^*\boldsymbol{\nabla}\psi-\psi\boldsymbol{\nabla}\psi^*) \tag{0.0.14}$$

確率流密度を,

$$\boldsymbol{j} \coloneqq \frac{\hbar}{2\mathrm{i}m}(\psi^* \boldsymbol{\nabla}\psi - \psi \boldsymbol{\nabla}\psi^*) \tag{0.0.15}$$
$$= \frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}\,(\psi^* \boldsymbol{\nabla}\psi) \tag{0.0.16}$$

と定義する．**式** (0.0.15) を**式** (0.0.14) に代入すると，確率密度に対する連続の式である,

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho = -\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{j} \tag{0.0.17}$$

を得る[1].

次に微分断面積と散乱振幅の関係を考える．z 軸に平行に入射しているので入射波は,

$$\psi_{\mathrm{in}} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} \tag{0.0.18}$$

と書けるのであった．入射波は z 軸方向にしか存在しないので，その確率流密度の z 成分 j_z は**式** (**??**) より,

$$j_z = \frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}\left(\psi^* \frac{\partial}{\partial z}\psi\right) \tag{0.0.19}$$
$$= \frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kz}\mathrm{i}ke^{\mathrm{i}kz}\right) \tag{0.0.20}$$
$$= \frac{\hbar k}{m} \tag{0.0.21}$$

である．

散乱波は,

$$\psi_{\mathrm{sc}} = \frac{f(\theta)}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} \tag{0.0.22}$$

と書けるのであった．散乱波は r 軸方向にしか存在しないので，その確率流密度の r 成分 $j_r(\theta)$ は,

$$j_r(\theta) = \frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}\left(\psi_{\mathrm{sc}}^* \frac{\partial}{\partial r}\psi_{\mathrm{sc}}\right) \tag{0.0.23}$$
$$= \frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}\left[\frac{f(\theta)^*}{r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}\left(\frac{\mathrm{i}k}{r} - \frac{1}{r^2}\right)f(\theta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}\right] \tag{0.0.24}$$
$$= \frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}\left[-\frac{|f(\theta)|^2}{r^3} + \mathrm{i}k\frac{|f(\theta)|^2}{r^2}\right] \tag{0.0.25}$$
$$= \frac{\hbar}{m}k\frac{|f(\theta)|^2}{r^2} \tag{0.0.26}$$
$$= \frac{|f(\theta)|^2}{r^2}j_z \tag{0.0.27}$$

である．

さて，微分断面積と散乱振幅の関係について考えよう．微分断面積と粒子数の関係の両辺を n で割ると,

$$\mathrm{d}N = \sigma(\theta)n\,\mathrm{d}\Omega \tag{0.0.28}$$
$$\Leftrightarrow \frac{\mathrm{d}N}{n} = \sigma(\theta)\,\mathrm{d}\Omega \tag{0.0.29}$$

となる．$\dfrac{\mathrm{d}N}{n}$ は,

$$\frac{\mathrm{d}N}{n} = \frac{(\text{単位時間に位置 } (r,\theta) \text{ にある 検出器 } \mathrm{d}S \text{ に入射する粒子数})}{(\text{単位時間単位面積当たりの入射粒子数})} \tag{0.0.30}$$

[1] 両辺に電荷をかければ電荷保存の法則となる．

$$= \frac{(\text{単位時間に位置 } (r,\theta) \text{ にある検出器 } \mathrm{d}S \text{ に粒子が入射する確率})}{(\text{単位時間単位面積当たりに粒子が入射する確率})} \tag{0.0.31}$$

$$= \frac{j_r \,\mathrm{d}S}{j_z} \tag{0.0.32}$$

と書けるので,

$$\sigma(\theta)\,\mathrm{d}\Omega = |f(\theta)|^2 \frac{\mathrm{d}S}{r^2} \tag{0.0.33}$$

が得られる．**式** (**??**) より，$\mathrm{d}\Omega = \dfrac{\mathrm{d}S}{r^2}$ であるから,

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 \tag{0.0.34}$$

という関係が成り立つ．これは，散乱振幅から微分断面積が求められることを意味する．

散乱振幅と微分断面積の関係

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 \tag{0.0.35}$$

0.0.3 散乱振幅の表式

最後に散乱振幅 $f(\theta)$ の表式を求める．散乱の Schrödinger 方程式は,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + V(r)\right)\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{0.0.36}$$

であった．κ，$U(\boldsymbol{r})$ を,

$$\kappa \coloneqq \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{0.0.37}$$

$$U(\boldsymbol{r}) \coloneqq \frac{2m}{\hbar^2}V(\boldsymbol{r}) \tag{0.0.38}$$

と定義すると,

$$\left(\boldsymbol{\nabla}^2 + \kappa^2\right)\psi(\boldsymbol{r}) = U(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) \tag{0.0.39}$$

と表せる．**式** (0.0.39) の解は，Helmholtz 方程式型の斉次式,

$$\left(\boldsymbol{\nabla}^2 + \kappa^2\right)\phi(\boldsymbol{r}) = 0 \tag{0.0.40}$$

の z 方向に入射した場合の一般解 $\phi(\boldsymbol{r}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}$ と，非斉次の方程式,

$$\left(\boldsymbol{\nabla}^2 + \kappa^2\right)\chi(\boldsymbol{r}) = U(\boldsymbol{r})\chi(\boldsymbol{r}) \tag{0.0.41}$$

の解となる $\chi(\boldsymbol{r})$ の和である．

では，**式** (0.0.41) の特解を求めよう．レシピはこうである．

1. $\left(\boldsymbol{\nabla}^2 + \kappa^2\right)G_0(\boldsymbol{r}) = \delta(\boldsymbol{r})$ を満たす Green 関数 G_0 を求める．
2. $\chi(\boldsymbol{r}) = \displaystyle\int \mathrm{d}\boldsymbol{r'}\, G_0(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r'})U(\boldsymbol{r'})\psi(\boldsymbol{r'})$ から特解を求める．

2. から特解が求められるのは,

$$\left(\boldsymbol{\nabla}^2 + \kappa^2\right)\chi(\boldsymbol{r}) = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r'}\,\left(\boldsymbol{\nabla}^2 + \kappa^2\right)G_0(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r'})U(\boldsymbol{r'})\psi(\boldsymbol{r'}) \tag{0.0.42}$$

$$= \int \mathrm{d}\boldsymbol{r'}\, \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r'}) U(\boldsymbol{r'}) \psi(\boldsymbol{r'}) \tag{0.0.43}$$

$$= U(\boldsymbol{r}) \psi(\boldsymbol{r}) \tag{0.0.44}$$

が成り立つからだ.

まず，1. で定義した Green 関数の関係式,

$$\left(\boldsymbol{\nabla}^2 + \kappa^2\right) G_0(\boldsymbol{r}) = \delta(\boldsymbol{r}) \tag{0.0.45}$$

の両辺を Fourier 変換すると,

$$\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\, \left(\boldsymbol{\nabla}^2 + \kappa^2\right) G_0(\boldsymbol{r}) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\, \delta(\boldsymbol{r}) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{0.0.46}$$

$$\Leftrightarrow \left[(-\mathrm{i}\boldsymbol{k})^2 + \kappa^2\right] \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\, G_0(\boldsymbol{r}) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = 1 \tag{0.0.47}$$

となる．Green 関数 $G_0(\boldsymbol{r})$ の Fourier 変換を $\tilde{G}_0(\boldsymbol{k})$ と書くと,

$$\tilde{G}_0(\boldsymbol{k}) = \frac{1}{\kappa^2 - k^2} \tag{0.0.48}$$

を得る．よって Green 関数は $\tilde{G}_0(\boldsymbol{k})$ を逆 Fourier 変換して,

$$G_0(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \mathrm{d}\boldsymbol{k}\, \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}}{\kappa^2 - k^2} \tag{0.0.49}$$

と表される．極座標に変換して**式** (0.0.49) の積分を実行すると,

$$
\begin{aligned}
G_0(\boldsymbol{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int \mathrm{d}\boldsymbol{k}\, \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}}{\kappa^2 - k^2} && (0.0.50)\\
&= \frac{1}{(2\pi)^3} \int \mathrm{d}\boldsymbol{k}\, \frac{\exp\left(\mathrm{i}kr\cos\theta\right)}{\kappa^2 - k^2} && (0.0.51)\\
&= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\phi=0}^{2\pi} \mathrm{d}\phi \int_{k=0}^{\infty} \mathrm{d}k \int_{\theta=0}^{\pi} \mathrm{d}\theta\, \frac{\exp(\mathrm{i}kr\cos\theta)}{\kappa^2 - k^2} k^2 \sin\theta && (0.0.52)\\
&= \frac{1}{(2\pi)^3} 2\pi \int_{k=0}^{\infty} k^2\, \mathrm{d}k \int_{\theta=0}^{\pi} \mathrm{d}\theta \sin\theta \frac{\exp(\mathrm{i}kr\cos\theta)}{\kappa^2 - k^2} && (0.0.53)\\
&= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} k^2 \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{\mathrm{i}kr(\kappa^2 - k^2)}\, \mathrm{d}k && (0.0.54)\\
&= \frac{1}{4\pi^2 \mathrm{i}r} \int_0^{\infty} k \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{(\kappa - k)(\kappa + k)}\, \mathrm{d}k && (0.0.55)\\
&= \frac{1}{8\pi^2 \mathrm{i}r} \int_{-\infty}^{\infty} k \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{(\kappa - k)(\kappa + k)}\, \mathrm{d}k && (0.0.56)\\
&= \frac{1}{8\pi^2 \mathrm{i}r} \int_{-\infty}^{\infty} k \left[\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{(\kappa - k)(\kappa + k)} - \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{(\kappa - k)(\kappa + k)}\right] \mathrm{d}k && (0.0.57)\\
&= \frac{\mathrm{i}}{8\pi^2 r} \int_{-\infty}^{\infty} k \left[\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{(k - \kappa)(k + \kappa)} - \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{(k - \kappa)(k + \kappa)}\right] \mathrm{d}k && (0.0.58)\\
&= \frac{\mathrm{i}}{4\pi^2 r} I && (0.0.59)
\end{aligned}
$$

となる．ただし，I は,

$$I := \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{(k - \kappa)(k + \kappa)}\, \mathrm{d}k \tag{0.0.60}$$

である．式変形の途中で,

$$-\int_{-\infty}^{\infty} k \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{(k - \kappa)(k + \kappa)}\, \mathrm{d}k = -\int_{\infty}^{-\infty} (-k) \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(-k)r}}{((-k) - \kappa)((-k) + \kappa)} (-\,\mathrm{d}k) \tag{0.0.61}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} k \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{(k-\kappa)(k+\kappa)}\,\mathrm{d}k = I \tag{0.0.62}$$

なる関係を用いた．I を計算するには留数定理を用いる．

留数定理

複素関数 $f(z)$ が閉経路 C 内に m 個の特異点 $b_1, \cdots b_m$ を持つとすると，

$$\oint_C f(z)\,\mathrm{d}z = 2\pi\mathrm{i}\sum_{k=1}^{m}\mathrm{Res}(b_k; f) \tag{0.0.63}$$

が成立する．

今回の場合は特異点は κ と $-\kappa$ である．しかし，極の避け方にはいくつかのパターンがあり，それに応じて Green 関数の計算結果は複数存在する．これは何ら不自然なことではない．今計算しているのは，$\left(\boldsymbol{\nabla}^2+\kappa^2\right)$ なる演算子の固有関数 G_0 を求めているので，複数存在してもよい．まず，**図 1** のように $-\kappa$ を上に避け，κ を下に避けると，積分経路 C で囲まれている領域に存在する特異点は，$k=\kappa$ のみであるので，

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{(k-\kappa)(k+\kappa)}\,\mathrm{d}k \tag{0.0.64}$$

$$= 2\pi\mathrm{i}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\kappa r}}{2} \tag{0.0.65}$$

$$= \pi\mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\kappa r} \tag{0.0.66}$$

となるから，

$$G_0(\boldsymbol{r}) = \frac{\mathrm{i}}{4\pi^2 r}I \tag{0.0.67}$$

$$= -\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\kappa r}}{4\pi r} \tag{0.0.68}$$

となる[2]．計算しているのは，外向き球面波解であるため，**図 1** で示した経路で積分した結果が最も合理的であるから，この Green 関数を採用して以下の計算を行う．Green 関数を用いると**式** (0.0.1) の形式解は，

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \phi(\boldsymbol{r}) + \chi(\boldsymbol{r}) \tag{0.0.69}$$

$$= \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} + \int \mathrm{d}\boldsymbol{r'}\, G_0(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'})U(\boldsymbol{r'})\phi(\boldsymbol{r'}) \tag{0.0.70}$$

$$= \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} - \int \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\kappa|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'}|}}{4\pi|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'}|}\cdot\frac{2m}{\hbar^2}V(\boldsymbol{r'})\cdot\psi(\boldsymbol{r'}\,\mathrm{d}\boldsymbol{r'}) \tag{0.0.71}$$

$$= \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} - \frac{1}{4\pi}\int \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\kappa|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'}|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'}|}\frac{2m}{\hbar^2}V(r')\psi(\boldsymbol{r'})\,\mathrm{d}\boldsymbol{r'} \tag{0.0.72}$$

である．

[2] 積分経路 C に $-\kappa$ と κ がそれぞれ含まれるか否かを分類して求めた Green 関数は，

$$G_0(\boldsymbol{r}) = \begin{cases} \text{不適} & \text{-}\kappa\text{: 含まない}, \kappa\text{: 含まない} \\ \dfrac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\kappa r}}{4\pi r} & \text{-}\kappa\text{: 含まない}, \kappa\text{: 含む} \\ \dfrac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\kappa r}}{4\pi r} & \text{-}\kappa\text{: 含む}, \kappa\text{: 含まない} \\ \mathrm{i}\dfrac{\sin(\kappa r)}{4\pi r} & \text{-}\kappa\text{: 含む}, \kappa\text{: 含む} \end{cases}$$

$-\kappa$ と κ をともに含まない経路で計算したとき，$I=0$ となるが，固有関数は 0 であってはいけないから，不適である．

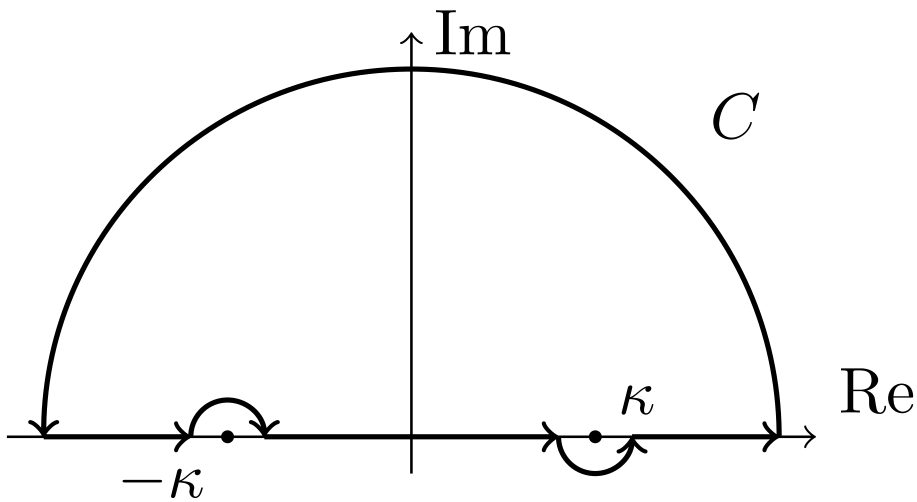

図 1: 積分経路

次に**式** (0.0.72) から散乱振幅 $f(\theta)$ を求める．$V(r')$ は $r' < a$ でのみ $V \neq 0$ であると仮定する．**図 0.0.72** において $r \gg r'$ では,

$$|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r'}| = \sqrt{r^2 - 2\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{r'} + r'^2} \tag{0.0.73}$$

$$= r\left[1 - \frac{2\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{r'}}{r^2} + \left(\frac{r'}{r}\right)^2\right]^{1/2} \tag{0.0.74}$$

$$\simeq r - \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r'} \tag{0.0.75}$$

が成り立つ．よって,

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\kappa|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'}|} \simeq \mathrm{e}^{\mathrm{i}\kappa(r - \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r'})} \tag{0.0.76}$$

$$= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\kappa r} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{\kappa}\cdot\boldsymbol{r'}} \tag{0.0.77}$$

と近似できる．ただし，$\boldsymbol{\kappa} \coloneqq \kappa\boldsymbol{n}$ を z 軸と角度 θ をなす散乱方向の波数ベクトルとする．また,

$$\frac{1}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r'}|} = \frac{1}{r}\left[1 - \frac{2\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{r'}}{r^2} + \left(\frac{r'}{r}\right)^2\right]^{-1/2} \tag{0.0.78}$$

$$\simeq \frac{1}{r} \tag{0.0.79}$$

と近似する．**式** (0.0.77) や**式** (0.0.79) で行った近似結果を**式** (0.0.72) に代入すると,

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} - \left(\frac{1}{4\pi}\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{\kappa'}\cdot\boldsymbol{r'}}\frac{2m}{\hbar^2}V(r')\psi(\boldsymbol{r'})\,\mathrm{d}\boldsymbol{r'}\right)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\kappa r}}{r} \tag{0.0.80}$$

である．したがって，散乱振幅は

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r'}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{\kappa'}\cdot\boldsymbol{r'}}\frac{2m}{\hbar^2}V(r')\psi(\boldsymbol{r'}) \tag{0.0.81}$$

となる．