

近似法の一つである部分波展開を扱う。まず、半古典論を用いて散乱が起こる条件から、方位量子数 l ごとに波動関数を展開して、 l が小さい波動関数のみ考えればよいことが分かる。次に、波動関数の基底展開について議論を行う。関数空間には様々な直交基底が存在するが、今回は Legendre 多項式を基底に取る。最後に、展開に用いた未定係数を用いて、散乱断面積や全断面積をその未定係数を用いて表す。

0.0.1 散乱の条件

古典力学において角運動量 \mathbf{L} は、

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = m\mathbf{r} \times \mathbf{v} \quad (0.0.1)$$

と書けるのであった。球対称ポテンシャルの下では、

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = m \frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{v} + m\mathbf{r} \times \frac{d\mathbf{v}}{dt} \quad (0.0.2)$$

$$= \mathbf{r} \times \mathbf{F} \quad (0.0.3)$$

$$= \mathbf{r} \times (-\nabla V(r)) \quad (0.0.4)$$

$$= \mathbf{r} \times \left| \nabla V \right| \frac{\mathbf{r}}{r} \quad (0.0.5)$$

$$= 0 \quad (0.0.6)$$

より、角運動量は保存される。衝突パラメータを b 、運動量を \mathbf{p} とした粒子の角運動量は、

$$|\mathbf{L}| = |\mathbf{r} \times \mathbf{p}| \quad (0.0.7)$$

$$= pb \quad (0.0.8)$$

である。散乱体を半径 a の球とすると、衝突の条件は

$$b < a \quad (0.0.9)$$

$$L/p < a \quad (0.0.10)$$

$$L < pa \quad (0.0.11)$$

である。つまり、角運動量が小さい粒子のみ散乱することがわかる。

式 (0.0.11) を半古典的な散乱条件へ書き直すことを考える。量子力学では、角運動量の大きさ L は、 $l = 0, 1, 2, \dots$ の値を取る方位量子数 l を用いて $L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$ と書けるので、衝突の条件は、

$$L = \hbar\sqrt{l(l+1)} < pa = \hbar ka \quad (0.0.12)$$

と書ける。式 (0.0.12) を見れば、散乱の影響を受けるのは l が小さいときのみであることがわかる。よって波動関数を、

$$\psi = \phi^{(l=0)} + \phi^{(l=1)} + \dots \quad (0.0.13)$$

のように異なる l に属する固有関数で展開し、 l が小さい状態についてだけ散乱の影響を考える。これを**部分波展開**という。

0.0.2 波動関数の基底展開

さて、式 (??) で示した散乱の波動関数、

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (0.0.14)$$

を部分波展開する¹ことを考える。まず、Legendre 多項式の性質を調べて、直交性を知る。次に、Legendre 多項式を用いて波動関数を展開して、展開係数 B_{ml} が満たすべき微分方程式を導く。続いて、Bessel の微分方程式の解である Bessel 関数の表式を求めて、球 Bessel 関数と球 Neumann 関数、球 Hankel 関数を定義する。最後に、展開係数 B_{ml} が球 Bessel 関数と球 Neumann 関数の線型結合で書けることを確かめて、線型結合の係数が波動関数を特徴づけるものだと知る。

¹ここから式 (0.0.71) までは飛ばしても良い。

0.0.2.1 Sturm-Liouville 演算子の Hermite 性

$a < b$ として, $x \in [a, b]$ で定義された関数空間 V を考える. $\rho(x)$ を非負の実数関数として, $f, g \in V$ に対して,

$$\langle f, g \rangle := \int_a^b f^*(x)g(x)\rho(x) dx \quad (0.0.15)$$

なる内積を入れる. 関数空間 V 上の演算子として \mathcal{L} を,

$$\mathcal{L} := \frac{1}{\rho(x)} \left[\frac{d}{dx} \left\{ p(x) \frac{d}{dx} \right\} + q(x) \right] \quad (0.0.16)$$

とする. 式 (0.0.16) なる形をした演算子を Sturm-Liouville 演算子という. 境界条件を, $\forall f \in V$ について,

$$\begin{cases} f(a) = f(b) \\ p(a)f'(a) = p(b)f'(b) \end{cases} \quad (0.0.17)$$

とすると,

$$\langle f, \mathcal{L}g \rangle = \langle \mathcal{L}f, g \rangle \quad (0.0.18)$$

が成立する. 式 (0.0.18) なる関係が成り立つ演算子 \mathcal{L} を Hermite 演算子という.

Proof. 内積の定義より,

$$\langle f, \mathcal{L}g \rangle = \int_a^b f^*(x) \frac{1}{\rho(x)} \left[\frac{d}{dx} \left\{ p(x) \frac{d}{dx} g(x) \right\} + q(x)g(x) \right] \rho(x) dx \quad (0.0.19)$$

$$= \int_a^b f^*(x) \left[\frac{d}{dx} \left\{ p(x) \frac{d}{dx} g(x) \right\} + q(x)g(x) \right] dx \quad (0.0.20)$$

$$= [f^*(x)g'(x)]_a^b - \int_a^b f'^*(x)p(x)g'(x) dx + \int_a^b f^*(x)q(x)g(x) dx \quad (0.0.21)$$

$$= [f^*(x)p(x)g'(x)]_a^b - [f'^*(x)p(x)g(x)]_a^b + \int_a^b g(x) \frac{1}{\rho(x)} \left[\frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{d}{dx} f^*(x) \right) + q(x)f^*(x) \right] \rho(x) dx \quad (0.0.22)$$

$$= [f^*(x)p(x)g'(x)]_a^b - [f'^*(x)p(x)g(x)]_a^b + \langle g, \mathcal{L}f \rangle^* \quad (0.0.23)$$

$$= [f^*(x)p(x)g'(x)]_a^b - [g(x)p(x)f'^*(x)]_a^b + \langle \mathcal{L}f, g \rangle \quad (0.0.24)$$

となる. 第 1 項と第 2 項について, 第 1 項に $f(a) = f(b)$ を, 第 2 項に $p(x)$ が実数値関数であり $p(a)f'(a) = p(b)f'(b)$ であることを用いると

$$[f^*(x)p(x)g'(x)]_a^b - [f'^*(x)p(x)g(x)]_a^b = \{p(b)g'(b) - p(a)f'(a)\}f^*(a) - \{g(b) - g(a)\}p(a)f'(a) \quad (0.0.25)$$

を得る. 今度は, 第 1 項に $p(x)$ が実数値関数であり $p(a)g'(a) = p(b)g'(b)$ であることを, 第 2 項に $g(a) = g(b)$ を用いれば,

$$\langle f, \mathcal{L}g \rangle = \langle \mathcal{L}f, g \rangle \quad (0.0.26)$$

を得る. □

0.0.2.2 Legendre 多項式

式 (0.0.16) において, $a = -b = 1$ とする. また,

$$\rho(x) := 1 \quad (0.0.27)$$

$$p(x) := 1 - x^2 \quad (0.0.28)$$

$$q(x) := -\frac{m^2}{1 - x^2}, \quad m \in \{0, 1, \dots\} \quad (0.0.29)$$

とすると,

$$\mathcal{L}_m = \frac{d}{dx} \left\{ (1-x^2) \frac{d}{dx} \right\} - \frac{m^2}{1-x^2} \quad (0.0.30)$$

となる. 関数の内積は,

$$\langle f, g \rangle = \int_{-1}^1 f^*(x) g(x) dx \quad (0.0.31)$$

と定義しておく. また, 境界条件は,

$$p(\pm 1) f^*(\pm 1) g'(\pm 1) = 0 \quad (0.0.32)$$

とする. これより, 演算子 \mathcal{L} が Hermite 演算子であると確かめられる. たとえば, $g'(x) = p(x)$ となるように $g(x)$ を定めれば, $f(1) = f(-1) = 0$ となる. また, $f(x) = 1$ となるように $f(x)$ を定めれば, $p(1)g'(1) = p(-1)g'(1) = 0$ となるので, 前節で示した境界条件を満足する. さて, Legendre 多項式 $P_n(x)$ は n を非負整数として,

$$\mathcal{L}_0 P_n(x) = -n(n+1) P_n(x) \quad (0.0.33)$$

$$\Leftrightarrow \frac{d}{dx} \left\{ (1-x^2) \frac{d}{dx} P_n(x) \right\} = -n(n+1) P_n(x) \quad (0.0.34)$$

なる $P_n(x)$ のうち, $x=0$ 周りで級数展開したもので,

$$P_n(x) = \sum_{j=0}^{\infty} u_j x^j \quad (0.0.35)$$

と書いたとき,

$$u_n = \frac{(2n)!}{2^n (n!)^2} \quad (0.0.36)$$

$$u_{n+1} = 0 \quad (0.0.37)$$

なるものである. 式 (0.0.35) を式 (0.0.34) に代入すると,

$$\frac{d}{dx} \left\{ (1-x^2) \frac{d}{dx} \sum_{j=0}^{\infty} u_j x^j \right\} = -n(n+1) \sum_{j=0}^{\infty} u_j x^j \quad (0.0.38)$$

$$\Leftrightarrow \sum_{j=0}^{\infty} j u_j \frac{d}{dx} (x^{j-1} - x^{j+1}) = -n(n+1) \sum_{j=0}^{\infty} u_j x^j \quad (0.0.39)$$

$$\Leftrightarrow \sum_{j=0}^{\infty} j(j-1) u_j x^{j-2} - \sum_{j=0}^{\infty} j(j+1) u_j x^j = -n(n+1) \sum_{j=0}^{\infty} u_j x^j \quad (0.0.40)$$

$$\Leftrightarrow \sum_{j=0}^{\infty} j(j-1) u_j x^{j-2} = \sum_{j=0}^{\infty} u_j [j(j+1) - n(n+1)] x^j \quad (0.0.41)$$

$$\Leftrightarrow \sum_{j=2}^{\infty} j(j-1) u_j x^{j-2} = \sum_{j=0}^{\infty} u_j [j(j+1) - n(n+1)] x^j \quad (0.0.42)$$

$$\Leftrightarrow \sum_{j=0}^{\infty} (j+1)(j+2) u_{j+2} x^j = \sum_{j=0}^{\infty} u_j [j(j+1) - n(n+1)] x^j \quad (0.0.43)$$

となるから,

$$(j+1)(j+2) u_{j+2} = [j(j+1) - n(n+1)] u_j \quad (0.0.44)$$

なる漸化式が成立する．式 (0.0.44) において $j = n$ を代入すると， $u_{n+2} = 0$ となる．また， $j = n + 1$ を代入すると式 (0.0.37) より $u_{n+1} = 0$ である．よって，

$$0 = u_{n+1} = u_{n+2} = u_{n+3} = u_{n+4} = \dots \quad (0.0.45)$$

となる．また，式 (0.0.44) に $j = n - 2$ を代入すると，

$$u_{n-2} = -\frac{n(n-1)}{2(2n-1)}u_n \quad (0.0.46)$$

となる．よって，式 (0.0.36) と式 (0.0.46) を用いて式 (0.0.35) を表すと，

$$P_n(x) = \frac{(2n)!}{2^n(n!)^2} \left[x^n - \frac{n(n-1)}{2(2n-1)}x^{n-2} + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2 \cdot 4 \cdot (2n-1)(2n-3)}x^{n-4} + \dots \right] \quad (0.0.47)$$

$$= \sum_{s=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^s \frac{(2n-2s)!}{2^n s!(n-s)!(n-2s)!} x^{n-2s} \quad (0.0.48)$$

となる．なお，Legendre 多項式は，

$$\frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n = \sum_{s=0}^n \frac{d^n}{dx^n} (-1)^s \binom{n}{s} x^{2n-2s} \quad (0.0.49)$$

$$= \sum_{s=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^s \frac{n!}{s!(n-s)!} \frac{(2n-2s)!}{(n-2s)!} \quad (0.0.50)$$

なる関係を用いると，

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n \quad (0.0.51)$$

となる．

0.0.2.3 Legendre 陪多項式

Legendre 陪多項式 $P_n^m(x)$ は $m \leq n$ として，式 (0.0.51) を用いれば，

$$P_n^m(x) := (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_n(x) \quad (0.0.52)$$

$$= (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n \quad (0.0.53)$$

$$= \frac{1}{2^n n!} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2 - 1)^n \quad (0.0.54)$$

となる．Legendre 陪多項式の直交性は \mathcal{L}_m が Hermite 演算子であり，その固有関数である $P_n^m(x)$ が直交することより従う．自分自身との内積，つまり， $\langle P_n^m(x), P_n^m(x) \rangle$ の値を計算する．式 (0.0.54) を用いて，式 (0.0.31) で示した内積の定義に従って計算すると，

$$\langle P_n^m(x), P_n^m(x) \rangle = \int_{-1}^1 \frac{1}{2^{2n}(n!)^2} (1-x^2)^m \left\{ \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2 - 1)^n \right\} \left\{ \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2 - 1)^n \right\} dx \quad (0.0.55)$$

$$= \frac{1}{2^{2n}(n!)^2} \int_{-1}^1 (1-x^2)^m \left\{ \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2 - 1)^n \right\} \frac{d}{dx} \left\{ \frac{d^{n+m-1}}{dx^{n+m-1}} (x^2 - 1)^n \right\} dx \quad (0.0.56)$$

$$= \frac{1}{2^{2n}(n!)^2} \left[(1-x^2)^m \left\{ \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2 - 1)^n \right\} \left\{ \frac{d^{n+m-1}}{dx^{n+m-1}} (x^2 - 1)^n \right\} \right]_{-1}^1 \quad (0.0.57)$$

$$- \frac{1}{2^{2n}(n!)^2} \int_{-1}^1 \left\{ \frac{d}{dx} (1-x^2)^m \left\{ \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2 - 1)^n \right\} \right\} \left\{ \frac{d^{n+m-1}}{dx^{n+m-1}} (x^2 - 1)^n \right\} dx \quad (0.0.58)$$

$$= -\frac{1}{2^{2n}(n!)^2} \int_{-1}^1 \left\{ \frac{d}{dx} (1-x^2)^m \left\{ \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2 - 1)^n \right\} \right\} \left\{ \frac{d^{n+m+1}}{dx^{n+m+1}} (x^2 - 1)^n \right\} dx \quad (0.0.59)$$

$$= \dots \quad (0.0.60)$$

$$= \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n}(n!)^2} \int_{-1}^1 (x^2 - 1)^n \left\{ \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (1 - x^2)^m \left\{ \frac{d^{n+m}}{dx^{n+m}} (x^2 - 1)^n \right\} \right\} dx \quad (0.0.61)$$

$$= \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n}(n!)^2} \int_{-1}^1 (x^2 - 1)^n \left[\sum_{k=0}^{n+m} \binom{n+m}{k} \left\{ \frac{d^{n+m-k}}{dx^{n+m-k}} (1 - x^2)^m \right\} \left\{ \frac{d^{n+m+k}}{dx^{n+m+k}} (x^2 - 1)^n \right\} \right] dx \quad (0.0.62)$$

となる．最終行で Leibniz の公式を用いた．式 (0.0.62) の和の中の $n + m - k$ 階微分と $n + m + k$ 階微分を考える． $(1 - x^2)^m$ と $(x^2 - 1)^n$ の最高次数は，それぞれ $2m$ と $2n$ であるから， $2m \geq n + m - k$ かつ $2n \geq n + m + k$ なる k でのみ和の中は 0 でなくなる．つまり， $n - m \leq k$ かつ $n - m \geq k$ なる k は $k = n - m$ のみである．よって，式 (0.0.62) は，

$$\langle P_n^m(x), P_n^m(x) \rangle = \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n}(n!)^2} \int_{-1}^1 (x^2 - 1)^n \left[\sum_{k=0}^{n+m} \binom{n+m}{k} \left\{ \frac{d^{n+m-k}}{dx^{n+m-k}} (1 - x^2)^m \right\} \left\{ \frac{d^{n+m+k}}{dx^{n+m+k}} (x^2 - 1)^n \right\} \right] dx \quad (0.0.63)$$

$$= \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n}(n!)^2} \int_{-1}^1 (x^2 - 1)^n \left[\binom{n+m}{n-m} \left\{ \frac{d^{2m}}{dx^{2m}} (1 - x^2)^m \right\} \left\{ \frac{d^{2n}}{dx^{2n}} (x^2 - 1)^n \right\} \right] dx \quad (0.0.64)$$

$$= \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n}(n!)^2} (-1)^m (2m)!(2n)! \frac{(n+m)!}{(n-m)!(2m)!} \int_{-1}^1 (x^2 - 1)^n dx \quad (0.0.65)$$

$$= \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n}(n!)^2} (-1)^m (2m)!(2n)! \frac{(n+m)!}{(n-m)!(2m)!} (-1)^n 2 \frac{(2n)!!}{(2n+1)!!} \quad (0.0.66)$$

$$= \frac{2}{2n+1} \frac{(n+m)!}{(n-m)!} \quad (0.0.67)$$

となる．直交性とまとめて書くと，

$$\langle P_{n'}^m(x), P_n^m(x) \rangle = \delta_{n'}^n \frac{2}{2n+1} \frac{(n+m)!}{(n-m)!} \quad (0.0.68)$$

となる．

0.0.2.4 Legendre 陪多項式を用いた波動関数の展開

0.0.2.5 Bessel の微分方程式

0.0.2.6 波動関数の展開

以下では波動関数を Legendre 多項式で基底展開する手順を説明する．Helmholtz 方程式，

$$[\nabla^2 + \kappa^2]u(\mathbf{r}) = 0 \quad (0.0.69)$$

を球座標系で表すと，

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \kappa^2 \right] u(r, \theta, \phi) = 0 \quad (0.0.70)$$

である．

したがって，部分波展開した散乱の波動関数は

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(\kappa r) P_l(\cos \theta) + \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) a_l P_l(\cos \theta) \frac{e^{i\kappa r}}{r} \quad (0.0.71)$$

である．



部分波展開した散乱の波動関数

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta) + \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) a_l P_l(\cos \theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (0.0.72)$$

このとき、散乱断面積は

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 \quad (0.0.73)$$

$$= \sum_l \sum_{l'} (2l+1)(2l'+1) a_l^* a_{l'} P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) \quad (0.0.74)$$

である。全断面積は

$$\sigma^{\text{tot}} = 2\pi \int \sigma(\theta) \sin \theta d\theta \quad (0.0.75)$$

$$= 2\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)^2 |a_l|^2 \left(\frac{2}{2l+1} \right) \quad (0.0.76)$$

$$= 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |a_l|^2 \quad (0.0.77)$$

である。ここで、Legendre 多項式の直交性

$$\int_0^\pi P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \frac{2}{2l+1} \delta_{l,l'} \quad (0.0.78)$$

を用いた。以上の議論から、部分波展開を用いた散乱問題は未定係数 a_l を求めることに帰着する。

