

散乱体が球対称ポテンシャル $V(r)$ を持つとする。Schrödinger 方程式は以下になる。

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

ここで、 $V(r)$ は $r \rightarrow \infty$ で十分早く $V \rightarrow 0$ となるとする。 z 軸に沿う入射波は平面波なので

$$\psi_{\text{in}} = e^{ikz} \quad (z \rightarrow \infty) \quad (0.0.2)$$

と表せる。また、散乱波は外向きの球面波となるので

$$\psi_{\text{sc}} \simeq \frac{e^{ikr}}{r} \quad (r \rightarrow \infty) \quad (0.0.3)$$

である。散乱問題とは、 $\rightarrow \infty$ で

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} \quad (0.0.4)$$

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。

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。

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho = \frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) \quad (0.0.5)$$

$$= \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi + \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} \quad (0.0.6)$$

$$= -\frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\psi^*\psi + \psi^*\frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\psi \quad (0.0.7)$$

$$= \frac{\hbar}{2mi}[(\nabla^2\psi^*)\psi - \psi^*(\nabla^2\psi)] \quad (0.0.8)$$

$$= -\frac{\hbar}{2mi}\nabla \cdot (\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) \quad (0.0.9)$$

ここで、確率流密度を

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) \quad (0.0.10)$$

$$= \frac{\hbar}{m}\text{Im}(\psi^*\nabla\psi) \quad (0.0.11)$$

と定義すれば、確率密度に対する連続の式

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho = -\nabla \cdot \mathbf{j} \quad (0.0.12)$$

を得る。

次に微分断面積と散乱振幅の関係を考える。入射波は $\psi_{\text{in}} = e^{ikz}$ である。入射波の確率流密度は

$$j_z = \frac{\hbar}{m}\text{Im}(e^{-ikz}ike^{ikz}) \quad (0.0.13)$$

$$= \frac{\hbar k}{m} \quad (0.0.14)$$

である。散乱波は $\psi_{\text{sc}} = \frac{f(\theta)}{r}e^{ikr}$ である。散乱波の確率流密度は

$$j_r(\theta) = \frac{\hbar}{m}\text{Im}(\psi_{\text{sc}}^*\nabla\psi_{\text{sc}}) \quad (0.0.15)$$

$$\simeq \frac{\hbar}{m}\text{Im}(\psi_{\text{sc}}^*\frac{\partial}{\partial r}\psi_{\text{sc}}) \quad (0.0.16)$$

$$= \frac{\hbar}{m}\text{Im}\left[\frac{f(\theta)}{r}e^{-ikr}\left(\frac{ik}{r} - \frac{1}{r^2}\right)f(\theta)e^{ikr}\right] \quad (0.0.17)$$

$$\simeq \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left[\frac{f(\theta)}{r} e^{-ikr} \frac{ik}{r} f(\theta) e^{ikr} \right] \quad (0.0.18)$$

$$= \frac{\hbar}{m} \frac{k}{r^2} |f(\theta)|^2 \quad (0.0.19)$$

$$= \frac{|f(\theta)|^2}{r^2} j_z \quad (0.0.20)$$

である．ここで，1行目から2行目では

$$\nabla \psi_{\text{sc}} = \left(\frac{\partial}{\partial r} \mathbf{e}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \mathbf{e}_\theta + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \mathbf{e}_\phi \right) \psi_{\text{sc}} \quad (0.0.21)$$

$$\simeq \frac{\partial}{\partial r} \psi_{\text{sc}} \mathbf{e}_r \quad (r \rightarrow \infty) \quad (0.0.22)$$

という近似を用いた．

微分断面積と粒子数の関係

$$dN = \sigma(\theta) N d\Omega \quad (0.0.23)$$

の両辺を N で割る．

$$\frac{dN}{N} = \sigma(\theta) d\Omega \quad (0.0.24)$$

上式の左辺を言葉に直すと，

$$\frac{\text{単位時間に位置 } (r, \theta) \text{ にある } dS \text{ に入射する粒子数}}{\text{単位時間単位面積当たりの入射粒子数}} \quad (0.0.25)$$

である．これは

$$\frac{\text{単位時間に位置 } (r, \theta) \text{ にある } dS \text{ に粒子が入射する確率}}{\text{単位時間単位面積当たりに粒子が入射する確率}} = \frac{j_z dS}{j_z} \quad (0.0.26)$$

と等しいので

$$\sigma(\theta) d\Omega = \frac{|f(\theta)|^2 dS}{r^2} \quad (0.0.27)$$

が得られる．よって， $d\Omega = \frac{dS}{r^2}$ だから，

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 \quad (0.0.28)$$

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

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 \quad (0.0.29)$$

次に $f(\theta)$ を求めるための式を作る．散乱の Schrödinger 方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) \quad (0.0.30)$$

である．ここで，

$$\begin{cases} \kappa = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\ U(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r}) \end{cases} \quad (0.0.31)$$

とおくと,

$$(\nabla^2 + \kappa^2)\psi(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \quad (0.0.32)$$

と表せる. 式 (??) の解は,

$$(\nabla^2 + \kappa^2)\phi(\mathbf{r}) = 0 \quad (0.0.33)$$

の一般解 $\phi(\mathbf{r}) = e^{ikz}$ と

$$(\nabla^2 + \kappa^2)\chi(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})\chi(\mathbf{r}) \quad (0.0.34)$$

と特解 $\chi(\mathbf{r})$ の和である.

では, 式 (0.0.34) の特解を求めよう. レシピはこうである.

1. $(\nabla^2 + \kappa^2)G_0(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r})$ を満たす Green 関数 G_0 を求める.

2. $\chi(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\phi(\mathbf{r}')$ から特解を求める.

2 から特解が求められるのは,

$$(\nabla^2 + \kappa^2)\chi(\mathbf{r}) = (\nabla^2 + \kappa^2) \int d\mathbf{r}' G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\phi(\mathbf{r}') \quad (0.0.35)$$

$$= \int d\mathbf{r}' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\phi(\mathbf{r}') \quad (0.0.36)$$

$$= U(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) \quad (0.0.37)$$

が成り立つためである.

Green 関数を求めよう.

$$(\nabla^2 + \kappa^2)G_0(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}) \quad (0.0.38)$$

の両辺を Fourier 変換する.

$$(\nabla^2 + \kappa^2) \int d\mathbf{k}' G_0(\mathbf{k}')e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}' e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \quad (0.0.39)$$

$$\int d\mathbf{k} (-\mathbf{k}'^2 + \kappa^2)G_0(\mathbf{k}')e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}' e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \quad (0.0.40)$$

両辺を比較すると

$$(\kappa^2 - k'^2)G_0(\mathbf{k}') = \frac{1}{(2\pi)^2} \quad (0.0.41)$$

$$G_0(\mathbf{k}') = \frac{1}{(2\pi)^2(\kappa^2 - k'^2)} \quad (0.0.42)$$

を得る. よって Green 関数は

$$G_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{k}' \frac{e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}}}{\kappa^2 - k'^2} \quad (0.0.43)$$

と表される. 極座標に変換しこの積分を実行する.

$$G_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int \frac{\exp(i\mathbf{k}'r \cos \theta)}{\kappa^2 - k'^2} k'^2 \sin \theta d\theta d\phi dk' \quad (0.0.44)$$

$$= \int \frac{1}{(2\pi)^3} 2\pi \int_0^\infty k'^2 dk' \int_0^\pi \sin \theta d\theta \frac{\exp(i\mathbf{k}'r \cos \theta)}{\kappa^2 - k'^2} \quad (0.0.45)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \frac{k'^2 dk'}{\kappa^2 - k'^2} \frac{e^{ik'r} - e^{-ik'r}}{ik'r} \quad (0.0.46)$$

$$= \frac{1}{4\pi^2 i r} \int_0^\infty k' dk' \frac{e^{ik'r} - e^{-ik'r}}{(\kappa - k')(\kappa + k')} \quad (0.0.47)$$

$$= \frac{1}{8\pi^2 i r} \int_0^\infty k' dk' \frac{e^{ik'r} - e^{-ik'r}}{(\kappa - k')(\kappa + k')} \quad (0.0.48)$$

$$= \frac{1}{8\pi^2 i r} \int_0^\infty k' dk' \left(\frac{e^{ik'r}}{(\kappa - k')(\kappa + k')} - \frac{e^{-ik'r}}{(\kappa - k')(\kappa + k')} \right) \quad (0.0.49)$$

$$= \frac{1}{8\pi^2 i r} (I_1 - I_2) \quad (0.0.50)$$

$$I_1 \equiv \int_0^\infty dk' \frac{k' e^{ik'r}}{(\kappa - k')(\kappa + k')}, \quad I_2 \equiv \int_0^\infty dk' \frac{k' e^{-ik'r}}{(\kappa - k')(\kappa + k')} \quad (0.0.51)$$

最後の積分を実行するには Cauchy の積分公式を用いる。

Cauchy の積分公式

$$\oint \frac{f(z)}{(z - z_0)} dz = 2\pi i f(z_0) \quad (0.0.52)$$

今回の場合は極は κ と $-\kappa$ である。しかし、極の避け方はいくつかのパターンがあり、それに応じて Green 関数の計算結果は変化する。今回は図 1 のように $-\kappa$ を上に避け、 κ を下に避ける。まず I_1 を計算する。 I_1 は k' が虚部が正の値を取るときに小さな値をとる。よって、積分路は上方に閉じる形とする。この時、積分範囲内に極は κ のみになるため、

$$I_1 = -i\pi e^{i\kappa r} \quad (0.0.53)$$

となる。 I_2 の積分路は下方に閉じる形とする。この時積分範囲内に含まれる極は $-\kappa$ のみである。よって、

$$I_2 = i\pi e^{-i\kappa r} \quad (0.0.54)$$

したがって、Green 関数は

$$G_0(r) = -\frac{e^{i\kappa r}}{4\pi r} \quad (0.0.55)$$

となる。これは外に広がる球面波を表す。

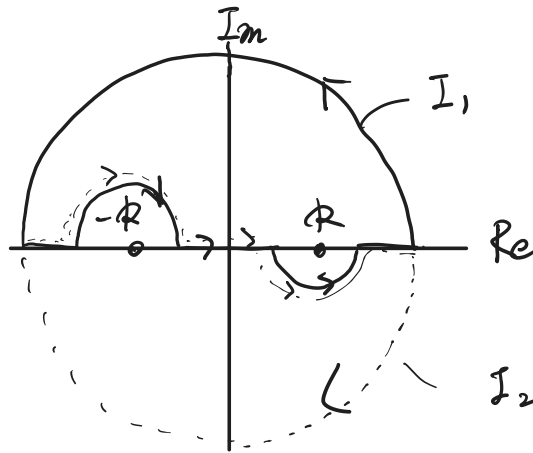


Figure 1: 積分経路

以上の計算から Schrödinger 方程式 (0.0.1) の形式解は

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} - \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \frac{2m}{\hbar^2} V(r') \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (0.0.56)$$

である。これは平面波と球面波の和となっている。

次に式 (0.0.56) から散乱振幅 $f(\theta)$ を求める。仮定として、 $V(r')$ は $r' < a$ でのみ $V \neq 0$ とする。式 (0.0.56) において $r \gg r'$ では

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = \sqrt{r^2 - 2\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}' + r'^2} \quad (0.0.57)$$

$$= r \sqrt{1 - \frac{2\mathbf{r}' \cdot \mathbf{n}}{r + \left(\frac{r'}{r}\right)^2}} \quad (0.0.58)$$

$$\simeq r - \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}' \quad (0.0.59)$$

が成り立つ。よって、

$$e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \simeq e^{ik(r-\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}')} \quad (0.0.60)$$

$$= e^{ikr} - e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} \quad (0.0.61)$$

を得る。ここで、 $\mathbf{k}' = k\mathbf{n}$ 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、

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \simeq \frac{1}{r \left(1 - \frac{\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}'}{r}\right)} \quad (0.0.62)$$

$$\simeq \frac{1}{r} \quad (0.0.63)$$

である。以上より、

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} - \left(\frac{1}{4\pi} \int d\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} \frac{2m}{\hbar^2} V(r') \psi(r') \right) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (0.0.64)$$

である。したがって、散乱振幅は

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \int d\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} \frac{2m}{\hbar^2} V(r') \psi(r') \quad (0.0.65)$$

となる。