

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 $f(\theta)$ を求めればよいことを知る。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

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

である。ここで、 $V(r)$ は $r \rightarrow \infty$ で r^{-1} より早く $V \rightarrow 0$ となるとする。なお、 $r \rightarrow \infty$ 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にすることにする。 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、 $r \rightarrow \infty$ で

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_{\text{in}} + \psi_{\text{sc}} \quad (0.0.4)$$

$$= e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (0.0.5)$$

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

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (0.0.6)$$

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、

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi \quad (0.0.7)$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi \quad (0.0.8)$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi^* \quad (0.0.9)$$

であることを用いると、

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

$$= \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (0.0.11)$$

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

$$= \frac{\hbar}{2im} [(\nabla^2 \psi^*) \psi - \psi^* (\nabla^2 \psi)] \quad (0.0.13)$$

$$= -\frac{\hbar}{2im} \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad (0.0.14)$$

確率流密度を,

$$\mathbf{j} := \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad (0.0.15)$$

$$= \frac{\hbar}{m} \text{Im} (\psi^* \nabla \psi) \quad (0.0.16)$$

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，

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = -\nabla \cdot \mathbf{j} \quad (0.0.17)$$

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，

$$\psi_{\text{in}} = e^{ikz} \quad (0.0.18)$$

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，

$$j_z = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial z} \psi \right) \quad (0.0.19)$$

$$= \frac{\hbar}{m} \text{Im} (e^{-ikz} i k e^{ikz}) \quad (0.0.20)$$

$$= \frac{\hbar k}{m} \quad (0.0.21)$$

である．

散乱波は，

$$\psi_{\text{sc}} = \frac{f(\theta)}{r} e^{ikr} \quad (0.0.22)$$

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，

$$j_r(\theta) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(\psi_{\text{sc}}^* \frac{\partial}{\partial r} \psi_{\text{sc}} \right) \quad (0.0.23)$$

$$= \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left[\frac{f(\theta)^*}{r} e^{-ikr} \left(\frac{ik}{r} - \frac{1}{r^2} \right) f(\theta) e^{ikr} \right] \quad (0.0.24)$$

$$= \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left[-\frac{|f(\theta)|^2}{r^3} + ik \frac{|f(\theta)|^2}{r^2} \right] \quad (0.0.25)$$

$$= \frac{\hbar}{m} k \frac{|f(\theta)|^2}{r^2} \quad (0.0.26)$$

$$= \frac{|f(\theta)|^2}{r^2} j_z \quad (0.0.27)$$

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，

$$dN = \sigma(\theta) n d\Omega \quad (0.0.28)$$

$$\Leftrightarrow \frac{dN}{n} = \sigma(\theta) d\Omega \quad (0.0.29)$$

となる． $\frac{dN}{n}$ は，

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

¹両辺に電荷をかければ電荷保存の法則となる．

$$= \frac{(\text{単位時間に位置 } (r, \theta) \text{ にある検出器 } dS \text{ に粒子が入射する確率})}{(\text{単位時間単位面積あたりに粒子が入射する確率})} \quad (0.0.31)$$

$$= \frac{j_r dS}{j_z} \quad (0.0.32)$$

と書けるので,

$$\sigma(\theta) d\Omega = |f(\theta)|^2 \frac{dS}{r^2} \quad (0.0.33)$$

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

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 \quad (0.0.34)$$

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

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 \quad (0.0.35)$$

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,

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

であった. κ , $U(\mathbf{r})$ を,

$$\kappa := \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (0.0.37)$$

$$U(\mathbf{r}) := \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r}) \quad (0.0.38)$$

と定義すると,

$$(\nabla^2 + \kappa^2) \psi(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad (0.0.39)$$

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

$$(\nabla^2 + \kappa^2) \phi(\mathbf{r}) = 0 \quad (0.0.40)$$

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

$$(\nabla^2 + \kappa^2) \chi(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}) \chi(\mathbf{r}) \quad (0.0.41)$$

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

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

2. から特解が求められるのは,

$$(\nabla^2 + \kappa^2) \chi(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' (\nabla^2 + \kappa^2) G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \quad (0.0.42)$$

$$= \int d\mathbf{r}' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \quad (0.0.43)$$

$$= U(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad (0.0.44)$$

が成り立つからだ。

まず、1. のステップで定義した Green 関数の関係式、

$$(\nabla^2 + \kappa^2) G_0(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}) \quad (0.0.45)$$

の両辺を Fourier 変換すると、

$$\int d\mathbf{r} (\nabla^2 + \kappa^2) G_0(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{r} \delta(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (0.0.46)$$

$$\Leftrightarrow [(-i\mathbf{k})^2 + \kappa^2] \int d\mathbf{r} G_0(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = \frac{1}{(2\pi)^3} \quad (0.0.47)$$

となる。Green 関数 $G_0(\mathbf{r})$ の Fourier 変換を $\tilde{G}_0(\mathbf{k})$ と書くと、

$$\tilde{G}_0(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{\kappa^2 - k^2} \quad (0.0.48)$$

を得る。よって Green 関数は $\tilde{G}_0(\mathbf{k})$ を逆 Fourier 変換して、

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

と表される。極座標に変換し式 (0.0.49) の積分を実行すると、

$$G_0(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{k} \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{\kappa^2 - k^2} \quad (0.0.50)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \frac{\exp(ikr \cos \theta)}{\kappa^2 - k^2} \quad (0.0.51)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\phi=0}^{2\pi} d\phi \int_{k=0}^{\infty} dk \int_{\theta=0}^{\pi} d\theta \frac{\exp(ikr \cos \theta)}{\kappa^2 - k^2} k^2 \sin \theta \quad (0.0.52)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} 2\pi \int_{k=0}^{\infty} k^2 dk \int_{\theta=0}^{\pi} d\theta \sin \theta \frac{\exp(ikr \cos \theta)}{\kappa^2 - k^2} \quad (0.0.53)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} k^2 \frac{e^{ikr} - e^{-ikr}}{ikr(\kappa^2 - k^2)} dk \quad (0.0.54)$$

$$= \frac{1}{4\pi^2 i r} \int_0^{\infty} k \frac{e^{ikr} - e^{-ikr}}{(\kappa - k)(\kappa + k)} dk \quad (0.0.55)$$

$$= \frac{1}{8\pi^2 i r} \int_{-\infty}^{\infty} k \frac{e^{ikr} - e^{-ikr}}{(\kappa - k)(\kappa + k)} dk \quad (0.0.56)$$

$$= \frac{1}{8\pi^2 i r} \int_{-\infty}^{\infty} k \left[\frac{e^{ikr}}{(\kappa - k)(\kappa + k)} - \frac{e^{-ikr}}{(\kappa - k)(\kappa + k)} \right] dk \quad (0.0.57)$$

$$= \frac{1}{4\pi^2 i r} I \quad (0.0.58)$$

となる。ただし、 I は、

$$I := \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k e^{ikr}}{(\kappa - k)(\kappa + k)} dk \quad (0.0.59)$$

である。式変形の途中で、

$$- \int_{-\infty}^{\infty} k \frac{e^{-ikr}}{(\kappa - k)(\kappa + k)} dk = - \int_{\infty}^{-\infty} (-k) \frac{e^{-i(-k)r}}{(\kappa - (-k))(\kappa + (-k))} (-dk) \quad (0.0.60)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} k \frac{e^{ikr}}{(\kappa - k)(\kappa + k)} dk = I \quad (0.0.61)$$

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, \dots, b_m を持つとすると、

$$\oint_C f(z) dz = 2\pi i \sum_{k=1}^m \text{Res}(b_k; f) \quad (0.0.62)$$

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、 $(\nabla^2 + \kappa)$ 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、式 (??) 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、

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k e^{ikr}}{(\kappa - k)(\kappa + k)} dk \quad (0.0.63)$$

$$= 2\pi i \frac{e^{i\kappa r}}{2} \quad (0.0.64)$$

$$= \pi i e^{i\kappa r} \quad (0.0.65)$$

となるから、

$$G_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi^2 i r} I \quad (0.0.66)$$

$$= \frac{e^{i\kappa r}}{4\pi r} \quad (0.0.67)$$

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??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、

$$\psi(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}) + \chi(\mathbf{r}) \quad (0.0.69)$$

$$= e^{ikz} + \int d\mathbf{r}' G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \phi(\mathbf{r}') \quad (0.0.70)$$

$$= e^{ikz} + \int d\mathbf{r}' \frac{e^{i\kappa|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \cdot \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r}') \cdot \psi(\mathbf{r}') \quad (0.0.71)$$

$$= e^{ikz} - \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{i\kappa|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (0.0.72)$$

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、

$$G_0(\mathbf{r}) = \begin{cases} \text{不適} & -\kappa: \text{含まない}, \kappa: \text{含まない} \\ \frac{e^{i\kappa r}}{4\pi r} & -\kappa: \text{含まない}, \kappa: \text{含む} \\ \frac{e^{-i\kappa r}}{4\pi r} & -\kappa: \text{含む}, \kappa: \text{含まない} \\ i \frac{\sin(\kappa r)}{4\pi r} & -\kappa: \text{含む}, \kappa: \text{含む} \end{cases} \quad (0.0.68)$$

$-\kappa$ 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．

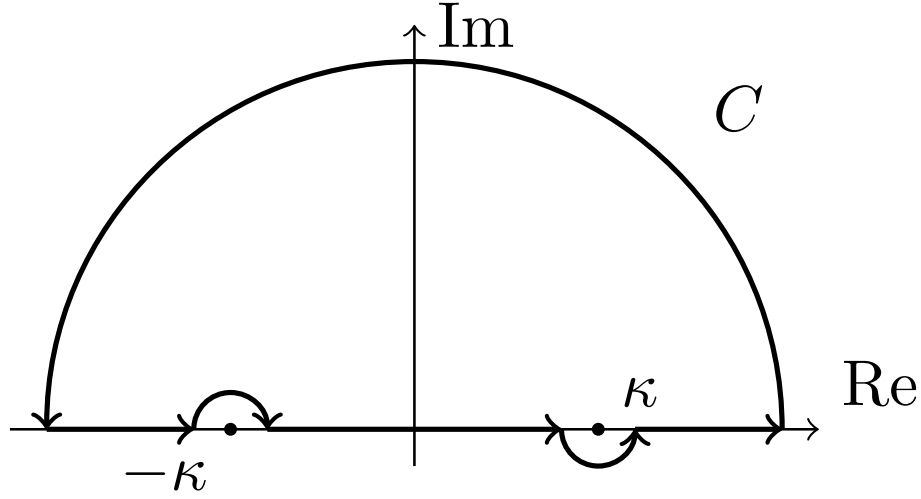


図 1: 積分経路

次に式(??)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．図??において $r \gg r'$ では

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = \sqrt{r^2 - 2\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}' + r'^2} \quad (0.0.73)$$

$$= r \sqrt{1 - \frac{2\mathbf{r}' \cdot \mathbf{n}}{r + \left(\frac{r'}{r}\right)^2}} \quad (0.0.74)$$

$$\simeq r - \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}' \quad (0.0.75)$$

が成り立つ．よって，

$$e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \simeq e^{ik(r - \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}')} \quad (0.0.76)$$

$$= e^{ikr} - e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} \quad (0.0.77)$$

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，

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \simeq \frac{1}{r(1 - \frac{\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}'}{r})} \quad (0.0.78)$$

$$\simeq \frac{1}{r} \quad (0.0.79)$$

である．以上より，

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} - \left(\frac{1}{4\pi} \int d\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} \frac{2m}{\hbar^2} V(r') \psi(r') \right) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (0.0.80)$$

である．したがって，散乱振幅は

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \int d\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} \frac{2m}{\hbar^2} V(r') \psi(r') \quad (0.0.81)$$

となる．