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，

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

と表せる．また，散乱波は外向きの球面波となるので，

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

である．散乱問題とは，$r\to\infty$ で

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

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

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，

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

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

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

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

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

確率流密度を,

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

$$= \frac{\hbar}{m}\operatorname{Im}(\psi^*\boldsymbol{\nabla}\psi) \tag{0.0.16}$$

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,

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

$$= \frac{\hbar}{m}\operatorname{Im}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kz}\mathrm{i}ke^{\mathrm{i}kz}\right) \tag{0.0.20}$$

$$= \frac{\hbar k}{m} \tag{0.0.21}$$

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,

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

$$= \frac{\hbar}{m}\operatorname{Im}\left[\frac{f(\theta)^*}{r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}\left(\frac{\mathrm{i}k}{r} - \frac{1}{r^2}\right)f(\theta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}\right] \tag{0.0.24}$$

$$= \frac{\hbar}{m}\operatorname{Im}\left[-\frac{|f(\theta)|^2}{r^3} + \mathrm{i}k\frac{|f(\theta)|^2}{r^2}\right] \tag{0.0.25}$$

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

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

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．

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

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

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,

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

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

と定義すると,

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

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

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

の一般解 $\phi(\boldsymbol{r}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i} \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r}}$ と，非斉次の方程式,

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

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

2. から特解が求められるのは,

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

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

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

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，

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

の両辺を Fourier 変換すると，

$$\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\,\left(\boldsymbol{\nabla}^2+\kappa^2\right)G_0(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = \frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\,\delta(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{0.0.46}$$

$$\Leftrightarrow \left[(-\mathrm{i}\boldsymbol{k})^2+\kappa^2\right]\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\,G_0(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = \frac{1}{(2\pi)^3} \tag{0.0.47}$$

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

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

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

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

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

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

$$= \frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}\boldsymbol{k}\,\frac{\exp\left(\mathrm{i}kr\cos\theta\right)}{\kappa^2-k^2} \tag{0.0.51}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{\phi=0}^{2\pi}\mathrm{d}\phi\int_{k=0}^{\infty}\mathrm{d}r\int_{\theta=0}^{\pi}\mathrm{d}\theta\,\frac{\exp(\mathrm{i}kr\cos\theta)}{\kappa^2-k^2}k^2\sin\theta \tag{0.0.52}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3}2\pi\int_{k=0}^{\infty}k^2\,\mathrm{d}k\int_{\theta=0}^{\pi}\mathrm{d}\theta\sin\theta\frac{\exp(\mathrm{i}kr\cos\theta)}{\kappa^2-k^2} \tag{0.0.53}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^{\infty}k^2\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{\mathrm{i}kr(\kappa^2-k^2)}\,\mathrm{d}k \tag{0.0.54}$$

$$= \frac{1}{4\pi^2\mathrm{i}r}\int_0^{\infty}k\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{(\kappa-k)(\kappa+k)}\,\mathrm{d}k \tag{0.0.55}$$

$$= \frac{1}{8\pi^2\mathrm{i}r}\int_{-\infty}^{\infty}k\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{(\kappa-k)(\kappa+k)}\,\mathrm{d}k \tag{0.0.56}$$

$$= \frac{1}{8\pi^2\mathrm{i}r}\int_{-\infty}^{\infty}k\left[\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{(\kappa-k)(\kappa+k)}-\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{(\kappa-k)(\kappa+k)}\right]\mathrm{d}k \tag{0.0.57}$$

$$= \frac{1}{8\pi^2\mathrm{i}r}(I_1-I_2) \tag{0.0.58}$$

となる．ただし，I_1 と I_2 は，

$$I_1 \coloneqq \int_{-\infty}^{\infty}\frac{k\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{(\kappa-k)(\kappa+k)}\,\mathrm{d}k \tag{0.0.59}$$

$$I_2 \coloneqq \int_{-\infty}^{\infty}\frac{k\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{(\kappa-k)(\kappa+k)}\,\mathrm{d}k \tag{0.0.60}$$

である．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

$$\oint \frac{f(z)}{(z - z_0)}\,\mathrm{d}z = 2\pi \mathrm{i} f(z_0) \tag{0.0.61}$$

今回の場合は極は 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，

$$I_1 = -\mathrm{i}\pi \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} \tag{0.0.62}$$

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，

$$I_2 = \mathrm{i}\pi \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} \tag{0.0.63}$$

したがって，Green 関数は

$$G_0(r) = -\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{4\pi r} \tag{0.0.64}$$

となる．これは外に広がる球面波を表す．

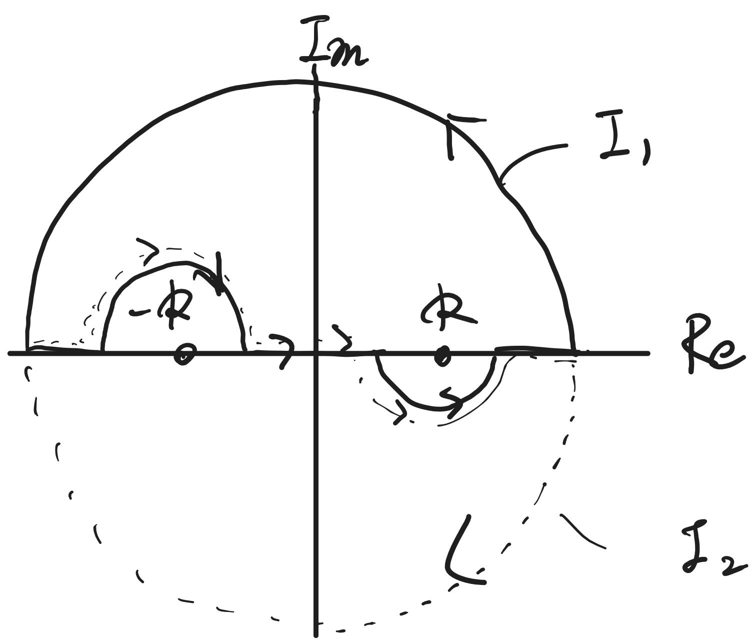

図 1: 積分経路

以上の計算から Schrödinger 方程式**式** (0.0.1) の形式解は

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} - \frac{1}{4\pi}\int \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'}|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'}|}\frac{2m}{\hbar^2}V(r')\psi(\boldsymbol{r'})\,\mathrm{d}r' \tag{0.0.65}$$

である．これは平面波と球面波の和となっている．

次に式 (0.0.65) 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 (0.0.65) において $r \gg r'$ では

$$|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'}| = \sqrt{r^2 - 2\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{r'} + r'^2} \tag{0.0.66}$$

$$= r\sqrt{1 - \frac{2\boldsymbol{r'}\cdot\boldsymbol{n}}{r + \left(\frac{r'}{r}\right)^2}} \tag{0.0.67}$$

$$\simeq r - \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r'} \tag{0.0.68}$$

が成り立つ．よって，

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'}|} \simeq \mathrm{e}^{\mathrm{i}k(r-\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r'})} \tag{0.0.69}$$

$$= \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k'}\cdot\boldsymbol{r'}} \tag{0.0.70}$$

を得る．ここで，$\boldsymbol{k'} = k\boldsymbol{n}$ 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，

$$\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'}|} \simeq \frac{1}{r\left(1 - \frac{\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r'}}{r}\right)} \tag{0.0.71}$$

$$=\simeq \frac{1}{r} \tag{0.0.72}$$

である．以上より，

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} - \left(\frac{1}{4\pi}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r'}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k'}\cdot\boldsymbol{r'}}\frac{2m}{\hbar^2}V(r')\psi(r')\right)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \tag{0.0.73}$$

である．したがって，散乱振幅は

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r'}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k'}\cdot\boldsymbol{r'}}\frac{2m}{\hbar^2}V(r')\psi(r') \tag{0.0.74}$$

となる．