

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 散乱問題の境界条件

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． $z$  軸方向への進行波である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<sup>1</sup>．

次に微分断面積と散乱振幅の関係を考える． $z$  軸方向へ進行波である入射波は，

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

と書けるのであった．入射波は  $z$  軸方向にのみ進行するので，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  $r$  軸方向にのみ進行するので，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，

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

<sup>1</sup>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.  $\kappa$ ,  $U(\mathbf{r})$  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,

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

と書ける. 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  $\phi(\mathbf{r}) = e^{i\kappa z}$  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. 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,

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

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

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

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

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

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

と表される. 極座標に変換して式 (0.0.49) の積分を実行すると,

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

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

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

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

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

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

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

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

$$= \frac{i}{8\pi^2 r} \int_{-\infty}^{\infty} k \left[ \frac{e^{ikr}}{(k - \kappa)(k + \kappa)} - \frac{e^{-ikr}}{(k - \kappa)(k + \kappa)} \right] dk \quad (0.0.58)$$

$$= \frac{i}{4\pi^2 r} I \quad (0.0.59)$$

となる. ただし,  $I$  は,

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

である. 式変形の途中で,

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

$$= \int_{-\infty}^{\infty} k \frac{e^{ikr}}{(k - \kappa)(k + \kappa)} dk = I \quad (0.0.62)$$

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  $b_1, \dots, b_m$  を持つとすると、

$$\oint_C f(z) dz = 2\pi i \sum_{l=1}^m \text{Res}(b_l; f) \quad (0.0.63)$$

が成立する．

今回の場合は特異点は  $\kappa$  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、 $(\nabla^2 + \kappa^2)$  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、 $\kappa$  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、

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k e^{ikr}}{(k - \kappa)(k + \kappa)} dk \quad (0.0.64)$$

$$= 2\pi i \frac{e^{i\kappa r}}{2} \quad (0.0.65)$$

$$= \pi i e^{i\kappa r} \quad (0.0.66)$$

となるから、

$$G_0(\mathbf{r}) = \frac{i}{4\pi^2 r} I \quad (0.0.67)$$

$$= -\frac{e^{i\kappa r}}{4\pi r} \quad (0.0.68)$$

となる<sup>2</sup>．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、

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

$$= e^{i\kappa z} + \int d\mathbf{r}' G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \quad (0.0.70)$$

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

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

である．

<sup>2</sup>積分経路  $C$  に  $-\kappa$  と  $\kappa$  がそれぞれ含まれるか否かを分類して求めた Green 関数は、

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

$-\kappa$  と  $\kappa$  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．

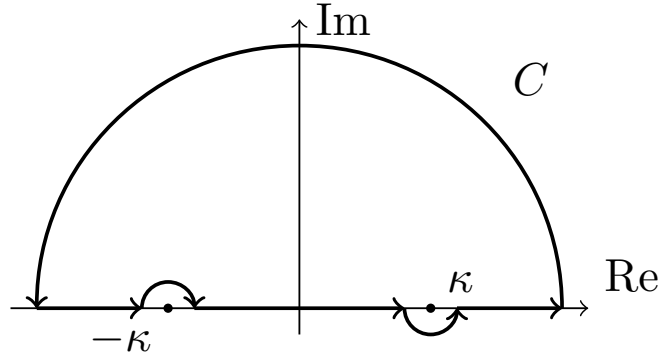


図 1: 積分経路

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

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

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

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

が成り立つ． よって,

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

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

と近似できる． ただし,  $\boldsymbol{\kappa}' := \kappa\mathbf{n}$  を  $z$  軸と角度  $\theta$  をなす散乱方向の波数ベクトルと定義した． また,

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

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

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,

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

を得る．

さて, 考えている散乱問題の波動関数は式 (0.0.6) より,

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (0.0.81)$$

と書けるのであった． 式 (0.0.81) と式 (0.0.80) を比較すると, 式 (0.0.80) において  $\kappa \rightarrow k$ ,  $\boldsymbol{\kappa}' \rightarrow \mathbf{k}'$  とすれば,

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} - \left( \frac{1}{4\pi} \int e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (0.0.82)$$

となる． したがって散乱振幅は,

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (0.0.83)$$

となる．

一般のポテンシャルでの散乱振幅

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (0.0.84)$$

