近似法の一つである部分波展開を扱う．古典力学において角運動量 $\boldsymbol{L}$ は,

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p} = m\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{v} \tag{0.0.1}$$

と書けるのであった．球対称ポテンシャルの下では,

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{L}}{\mathrm{d}t} = m\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} \times \boldsymbol{v} + m\boldsymbol{r} \times \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} \tag{0.0.2}$$
$$= \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{F} \tag{0.0.3}$$
$$= \boldsymbol{r} \times (-\boldsymbol{\nabla} V(r)) \tag{0.0.4}$$
$$= \boldsymbol{r} \times |\boldsymbol{\nabla} V|\frac{\boldsymbol{r}}{r} \tag{0.0.5}$$
$$= 0 \tag{0.0.6}$$

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 $\boldsymbol{p}$ とした粒子の角運動量は,

$$|\boldsymbol{L}| = |\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}| \tag{0.0.7}$$
$$= pb \tag{0.0.8}$$

である．散乱体を半径 a の球とすると，衝突の条件は

$$b < a \tag{0.0.9}$$
$$L/p < a \tag{0.0.10}$$
$$L < pa \tag{0.0.11}$$

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，$l = 0, 1, 2, \cdots$ 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,

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

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

$$\psi = \phi^{(l=0)} + \phi^{(l=1)} + \cdots \tag{0.0.13}$$

のように異なる l の固有関数で展開し，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．

さて，**式** (**??**) で示した散乱の波動関数,

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} + f(\theta)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \tag{0.0.14}$$

を部分波展開する[1]．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,

$$[\boldsymbol{\nabla}^2 + \kappa^2]\psi(\boldsymbol{r}) = 0 \tag{0.0.15}$$

を球座標系で表すと

$$\left[\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \kappa^2\right]\psi(r,\theta,\phi) = 0 \tag{0.0.16}$$

である．この方程式の解は動径波動関数 $R(r)$ と球面調和関数 $Y_{l,m}(\theta,\phi)$ を用いて

$$\psi(r,\theta,\phi) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} C_{lm}R(r)Y_{l,m}(\theta,\phi) \tag{0.0.17}$$

[1] ここから**式** (**??**) までは飛ばしても良い．

と表される．ここで，球面調和関数と Legendre 陪関数，Legendre 多項式は以下の関係にある．

$$Y_{l,m}(\theta,\phi) = (-1)^m \left[\frac{(2l+1)}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\right]^{1/2} P_l^m(\cos\theta)\exp(\mathrm{i}m\phi) \tag{0.0.18}$$

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{m/2}\frac{\mathrm{d}^m P_l(x)}{\mathrm{d}x^m} \tag{0.0.19}$$

いま，角度 ϕ によらないとすると，$m=0$ とすることで

$$\psi(r,\theta) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)R_l(r)P_l(\cos\theta) \tag{0.0.20}$$

を得る．$(2l+1)$ は縮退の数を表す．これを式 (0.0.16) に代入する．

$$\left[\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \kappa^2\right]\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)R_l(r)P_l(\cos\theta) = 0 \tag{0.0.21}$$

整理すると

$$\frac{P_l(\cos\theta)}{r}\left[2\frac{\partial R_l(r)}{\partial r} + r\frac{\partial^2 R_l(r)}{\partial r^2}\right] + \frac{R_l(r)}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}P_l(\cos\theta)\right) + \kappa^2 R_l(r)P_l(\cos\theta) = 0 \tag{0.0.22}$$

である．ここで，Legendre 多項式は

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[(1-x^2)\frac{\mathrm{d}P_l(x)}{\mathrm{d}x}\right] + l(l+1)P_l(x) = 0 \tag{0.0.23}$$

を満たす．これを変数変換すると

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left[\sin\theta\frac{\mathrm{d}P_l(\cos\theta)}{\mathrm{d}\theta}\right] + l(l+1)P_l(\cos\theta) = 0 \tag{0.0.24}$$

となる．よって，式 (**??**) は

$$\frac{P_l(\cos\theta)}{r}\left[2\frac{\partial R_l(r)}{\partial r} + r\frac{\partial^2 R_l(r)}{\partial r^2}\right] - l(l+1)\frac{R_l(r)}{r^2}P_l(\cos\theta) + \kappa^2 R_l(r)P_l(\cos\theta) = 0 \tag{0.0.25}$$

と変形される．したがって，$R_l(r)$ が満たすべき式は

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \kappa^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_l(r) = 0 \tag{0.0.26}$$

である．この微分方程式の解 $R_l(r)$ は球面 Bessel 関数 $j_l(\kappa r)$ と球面 Neumann 関数 $n_l(\kappa r)$ の和で与えられる．よって，波動関数は

$$\psi(r,\theta) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)[A_l j_l(\kappa r) + B_l n_l(\kappa r)]P_l(\cos\theta) \tag{0.0.27}$$

となる．また，球面 Bessel 関数と球面 Neumann 関数は以下の性質を持つ．

$$x \to 0 \tag{0.0.28}$$

$$j_l(x) \to \frac{x^l}{(2l+1)!}\left(1 - \frac{x^2}{2(2l+3)}\cdots\right) \tag{0.0.29}$$

$$n_l(x) \to -\frac{(2l-1)!!}{x^{l+1}} \tag{0.0.30}$$

平面波 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}z} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr\cos\theta}$ は明らかに Helmholtz 方程式を満たす．さらに，$r=0$ で有限の値をもつため，

$$B_l = 0 \tag{0.0.31}$$

であることがわかる．以上の計算から，

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\kappa r\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)A_l j_l(\kappa r)P_l(\cos\theta) \tag{0.0.32}$$

を得る．左辺を展開すると，

$$\sum_{l=0}^{\infty}\frac{(\mathrm{i}\kappa r\cos\theta)^l}{l!} \tag{0.0.33}$$

右辺を展開すると，

$$\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)A_l\frac{(\kappa l)^l}{(2l+1)!!}P_l(\cos\theta) \tag{0.0.34}$$

である．また，$P_l(\cos\theta)$ の $(\cos\theta)^l$ の項の係数は

$$\frac{1}{2^l l!}\frac{(2l)!}{l!} \tag{0.0.35}$$

である．よって，左辺と右辺を比較することで

$$\frac{(\mathrm{i}\kappa r\cos\theta)^l}{l!} = (2l+1)A_l\frac{(2l)!}{2^l(l!)^2}\frac{(\kappa r\cos\theta)^l}{(2l+1)!!} \tag{0.0.36}$$

$$A_l = \mathrm{i}^l \tag{0.0.37}$$

を得る．したがって，**Rayleigh の公式**

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{i}^l j_l(kr)P_l(\cos\theta) \tag{0.0.38}$$

が成り立つ．以上で，平面波の Legendre 多項式による表現が得られた．同様に，散乱振幅を未定係数 a_l を用いて

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)a_l P_l(\cos\theta) \tag{0.0.39}$$

と展開する．これにより球面波は

$$\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)a_l P_l(\cos\theta)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \tag{0.0.40}$$

と展開される．Legendre 多項式は完全性と直交性をもつためこの展開は妥当である．したがって，部分波展開した散乱の波動関数は

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{i}^l j_l(kr)P_l(\cos\theta) + \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)a_l P_l(\cos\theta)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \tag{0.0.41}$$

である．

部分波展開した散乱の波動関数

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{i}^l j_l(kr)P_l(\cos\theta) + \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)a_l P_l(\cos\theta)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \tag{0.0.42}$$

このとき，散乱断面積は

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 \tag{0.0.43}$$

$$= \sum_l \sum_{l'} (2l+1)(2l'+1) a_l^* a_{l'} P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) \tag{0.0.44}$$

である．全断面積は

$$\sigma^{\mathrm{tot}} = 2\pi \int \sigma(\theta) \sin\theta \, \mathrm{d}\theta \tag{0.0.45}$$

$$= 2\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)^2 |a_l|^2 \left(\frac{2}{2l+1} \right) \tag{0.0.46}$$

$$= 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |a_l|^2 \tag{0.0.47}$$

である．ここで，Legendre 多項式の直交性

$$\int_0^{\pi} P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) \sin\theta \, \mathrm{d}\theta = \frac{2}{2l+1} \delta_{l,l'} \tag{0.0.48}$$

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．

量子力学における散乱では，散乱の前後で位相が変化する．これを**位相シフト** (Phase shift) とよぶ．以下の 1 次元の例で位相シフトを確認する．ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (x < 0) \\ V_0 & (x \geq 0) \end{cases} \tag{0.0.49}$$

に左から入射する粒子を考える．入射粒子のエネルギーは $E < V_0$ とする．Schrödinger 方程式を解くことにより波動関数は

$$\psi(x) = \begin{cases} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + \dfrac{k - \mathrm{i}\alpha}{k + \mathrm{i}\alpha} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} & (x < 0) \\ \dfrac{2k}{k + \mathrm{i}\alpha} \mathrm{e}^{-\alpha x} & (x \geq 0) \end{cases} \tag{0.0.50}$$

となる．ただし，$k \equiv \sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}, \alpha \equiv \sqrt{\dfrac{2m(V-E)}{\hbar^2}}$ とおいた．式 (**??**) において $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ は入射波を，$\dfrac{k-\mathrm{i}\alpha}{k+\mathrm{i}\alpha}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$ は反射波を表している．反射波は

$$k + \mathrm{i}\alpha = \sqrt{k^2 + \alpha^2} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_k} \tag{0.0.51}$$

とすると

$$\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\delta_k} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \tag{0.0.52}$$

と表される．よって，波動関数は

$$\psi(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + \mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\delta_k} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \tag{0.0.53}$$

となる．この δ_k は位相シフトと呼ばれ，量子力学的散乱を特徴づけるパラメータである．

これを 3 次元に拡張する．式 (**??**) において $r \to \infty$ とすると，$j_l(kr) \to \dfrac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr - \frac{l\pi}{2})} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr - \frac{l\pi}{2})}}{2\mathrm{i}kr}$ であるため，

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2\mathrm{i}kr} \left[\mathrm{i}^l \left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr - \frac{l\pi}{2})} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr - \frac{l\pi}{2})} \right) + (2\mathrm{i}k) a_l \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} \right] P_l(\cos\theta) \tag{0.0.54}$$

を得る．さらに

$$\mathrm{i}^l \left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr - \frac{l\pi}{2})} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr - \frac{l\pi}{2})} \right) = \mathrm{i}^l \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{l\pi}{2}} \left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr} e^{\mathrm{i}l\pi} \right) \tag{0.0.55}$$

$$= 1 \cdot \left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} - (-1)^l\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr} \tag{0.0.56}$$

と直せるため，波動関数として

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \left[(1 + 2\mathrm{i}ka_l)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} - (-1)^l \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}\right] P_l(\cos\theta) \tag{0.0.57}$$

を得る．第 1 項は外向き球面波，第 2 項は内向き球面波を表す．この散乱は全反射であるため入射波と反射波の振幅は等しい．つまり，

$$|1 + 2\mathrm{i}ka_l| = 1 \tag{0.0.58}$$

が成り立つ．よって，散乱による位相のずれを δ_l とおくと

$$1 + 2\mathrm{i}ka_l = \mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_l} \tag{0.0.59}$$

である．この式から a_l を求めると

$$a_l = \frac{1}{2\mathrm{i}k}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l} - 1) \tag{0.0.60}$$

$$= \frac{1}{k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l} \sin\delta_l \tag{0.0.61}$$

を得る．さらに全断面積と散乱振幅を求めることができる．

$$\sigma^{\mathrm{tot}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)|a_l|^2 \tag{0.0.62}$$

$$= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\sin^2\delta_l \tag{0.0.63}$$

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) a_l P_l(\cos\theta) \tag{0.0.64}$$

$$= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l} \sin\delta_l P_l(\cos\theta) \tag{0.0.65}$$

ここで，$\theta = 0$ のとき，

$$f(0) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(\cos\delta_l + \mathrm{i}\sin\delta_l)\sin\delta_l P_l(1) \tag{0.0.66}$$

が成り立つ．したがって以下の**光学定理**が成り立つ．

光学定理

$$\sigma^{\mathrm{tot}} = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(0) \tag{0.0.67}$$

これは全断面積が前方散乱の散乱振幅からわかることを示している[2]．

[2] 砂川，散乱の量子論，「光学定理は，前方散乱によって，入射波の強度が減少した分だけ，四方に散乱されるという，まことに当然なことを述べているのである．」

例題 0.1: 半径 a の剛体球による散乱

散乱体のポテンシャルを

$$V(r)=\begin{cases}\infty & (r\leq a)\\ 0 & (r\geq a)\end{cases} \tag{0.0.68}$$

とする．低エネルギー散乱 ($ka\ll 1$) とする．このとき，散乱の影響を受けるのはほぼ $l=0$ のみである．式 (**??**) において $l=0$ とすることで

$$\psi(\boldsymbol{r})=\frac{1}{2\mathrm{i}kr}\left[(1+2\mathrm{i}ka_0)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}\right]P_0(\cos\theta) \tag{0.0.69}$$

を得る．位相シフトを考慮し $\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_0}=1+2\mathrm{i}ka_0$ とおく．境界条件より

$$\psi(r=a)=0 \tag{0.0.70}$$

であるから

$$\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_0}\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}=0 \tag{0.0.71}$$

が成り立つ．よって位相シフトは

$$\delta_0=-ka \tag{0.0.72}$$

である．全断面積は

$$\sigma^{\mathrm{tot}}=\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0 \tag{0.0.73}$$

$$\simeq\frac{4\pi}{k^2}\delta_0 \tag{0.0.74}$$

$$=4\pi a^2 \tag{0.0.75}$$

である．これは古典力学における剛体級の散乱 $\sigma^{\mathrm{tot}}=\pi a^2$ の 4 倍の値である．波長 $\lambda=\dfrac{2\pi}{k}$ が散乱体の半径 a より十分に大きいため，回折によって剛体球を取り囲み，球の表面積を疑似的に増加させたためと説明できる．

例題 0.2: 位相シフトの問題

散乱体から十分遠方での境界条件を満たし，ポテンシャル外における部分波展開した波動関数として

$$\psi(\boldsymbol{r})=\sum_{l=0}^{\infty}\mathrm{i}^l\frac{2l+1}{2}\left[\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_l}h_l^{(1)}(kr)+h_l^{(2)}(kr)\right]P_l(\cos\theta) \tag{0.0.76}$$

を用い，半径 a の剛体球

$$V(r)=\begin{cases}\infty & (r\leq a)\\ 0 & (r>a)\end{cases} \tag{0.0.77}$$

による散乱を考える．特に，ka が小さい低エネルギー散乱において，l の増大に伴ってその寄与が散乱に対してどの程度小さくなるか調べる．ここで，

$$h_l^{(1)}(kr)=j_l(kr)+\mathrm{i}n_l(kr),\ h_l^{(2)}(kr)=j_l(kr)-\mathrm{i}n_l(kr) \tag{0.0.78}$$

は球 Hankel 関数であり，$j_l(kr)$ は球 Bessel 関数，$n_l(kr)$ は球 Neumann 関数である．

1. 波動関数の境界条件をかんがえることで，散乱による位相シフト $\tan\delta_l$ を $j_l(ka)$ と $n_l(ka)$ を用いて表せ．

2. 低エネルギー散乱 ($ka \ll 1$) を考える．このとき

$$j_l(ka) \to \frac{(ka)^l}{(2l+1)!!},\ n_l(ka) \to -\frac{(2l-1)!!}{(ka)^{l+1}} \tag{0.0.79}$$

$$(2l+1)!! = (2l+1)(2l-1)\cdots 5\cdot 3\cdot 1 \tag{0.0.80}$$
$$(2l-1)!! = (2l-1)(2l-3)\cdots 3\cdot 1\cdot 1 \tag{0.0.81}$$

であることを用い，$l = 0, 1, 2$ についての位相シフト $\tan\delta_l$ を求めよ．得られる $\tan\delta_0$，$\tan\delta_1$，$\tan\delta_2$ は l の増加と共に位相シフトが急激に小さくなり，ka が小さい時，$l = 0$ だけ考えれば十分であることを示すものである．

---

1. 波動関数は剛体球の中に侵入できないため $r = a$ で $\psi = 0$ である．よって，

$$\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_l} h_l^{(1)}(ka) + h_l^{(2)}(ka) = 0 \tag{0.0.82}$$
$$\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_l}(j_l(ka) + \mathrm{i}n_l(ka)) + (j_l(ka) - \mathrm{i}n_l(ka)) = 0 \tag{0.0.83}$$
$$\left(\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_l} + 1\right) j_l(ka) + \mathrm{i}\left(\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_l} - 1\right) n_l(ka) = 0 \tag{0.0.84}$$
$$2\cos\delta_l j_l(ka) - 2\sin\delta_l n_l(ka) = 0 \tag{0.0.85}$$

となり，位相シフト

$$\tan\delta_l = \frac{j_l(ka)}{n_l(ka)} \tag{0.0.86}$$

が得られる．

2. 式 (**??**) を式 (**??**) に代入する．

$$\tan\delta_l \to \frac{(ka)^l}{(2l+1)!!}\left(-\frac{(ka)^{l+1}}{(2l-1)!!}\right) \tag{0.0.87}$$
$$= -\frac{(ka)^{2l+1}}{(2l+1)!!(2l-1)!!} \tag{0.0.88}$$
$$\tag{0.0.89}$$

$l = 0, 1, 2$ を代入する．ここで，$(n-2)!! = \dfrac{n!}{n}$ であることに注意する．

$$\tan\delta_0 = -ka \tag{0.0.90}$$
$$\tan\delta_1 = -\frac{1}{3}(ka)^3 \tag{0.0.91}$$
$$\tan\delta_2 = -\frac{1}{45}(ka)^5 \tag{0.0.92}$$