

練習問題 0.1: Griffith Problem10.21 Neutron diffraction

結晶による中性子散乱を考える．中性子と原子核の相互作用は短距離で，

$$V(\mathbf{r}) = \frac{2\pi\hbar^2 b}{m} \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \quad (0.0.1)$$

と近似されたとする．ここで， \mathbf{r}_i は i 番目の原子核の位置である． b は nuclear scattering length である．

1. 第 1Born 近似により散乱断面積は

$$\sigma = b^2 \left| \sum_i e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} \right|^2 \quad (0.0.2)$$

となることを示せ．ここで， $\mathbf{q} \equiv \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ ， \mathbf{k} は入射波， \mathbf{k}' は散乱波とする．

2. 原子核が間隔 a の格子状で並んでいるとし，

$$\mathbf{r}_i = la\mathbf{e}_x + ma\mathbf{e}_y + na\mathbf{e}_z \quad (0.0.3)$$

とする．ここで l, m, n は 0 から $N-1$ の整数である．

$$\sigma = b^2 \prod_{i=x,y,z} \frac{\sin^2(Nq_i a/2)}{\sin^2(q_i a/2)} \quad (0.0.4)$$

となることを示せ．

3.

$$\frac{1}{N} \frac{\sin^2(Nq_x a/2)}{\sin^2(q_x a/2)} \quad (0.0.5)$$

を $N = 1, 5, 10$ について横軸を $q_x a$ としたグラフを図示せよ．

1. 散乱振幅を計算する．

$$f^{(1)}(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{2\pi\hbar^2 b}{m} \sum_i \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_i) \right) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'} d\mathbf{r}' \quad (0.0.6)$$

$$= -b \sum_i \int e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}'} \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_i) d\mathbf{r}' \quad (0.0.7)$$

$$= -b \sum_i e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} \quad (0.0.8)$$

よって散乱断面積は

$$\sigma = \left| f^{(1)}(\theta) \right|^2 = b^2 \left| \sum_i e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} \right|^2 \quad (0.0.9)$$

である．

2.

$$\sum_i e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} = \sum_{l=0}^{N-1} \sum_{m=0}^{N-1} \sum_{n=0}^{N-1} e^{-i(la q_x + ma q_y + na q_z)} \quad (0.0.10)$$

$$= \sum_{l=0}^{N-1} e^{-ila q_x} \sum_{m=0}^{N-1} e^{-ima q_y} \sum_{n=0}^{N-1} e^{-ina q_z} \quad (0.0.11)$$

$$= \prod_{i=x,y,z} \frac{1 - e^{-iNaq_i}}{1 - e^{-iaq_i}} \quad (0.0.12)$$

$$= \prod_{i=x,y,z} \frac{\sin(Nq_i a/2)}{\sin(q_i a/2)} \quad (0.0.13)$$

よって,

$$\sigma = b^2 \prod_{i=x,y,z} \frac{\sin^2(Nq_i a/2)}{\sin^2(q_i a/2)} \quad (0.0.14)$$

が得られる.

3. 散乱パターンは下図のようになる.

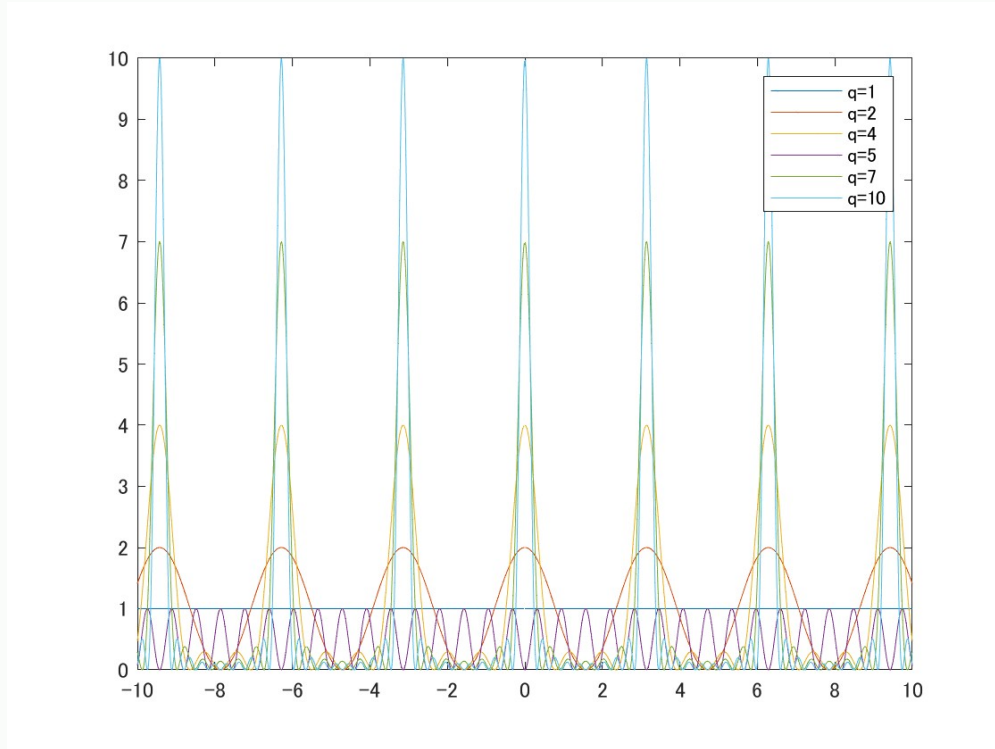


図 1: 散乱パターン

練習問題 0.2: Griffith Problem10.22 2次元散乱理論

2次元の散乱を考える.

1. 極座標ラプラシアン

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \quad (0.0.15)$$

を用いてポテンシャル $V(r)$ の下での波動関数を求めよ. ここで $u(r) = \sqrt{r}R(r)$ が

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(j^2 - 1/4)}{r^2} \right] u = Eu \quad (0.0.16)$$

を満たすことを用いてよい. j は整数である.

2. r が十分大きいときの式 (0.0.16) を考えることにより,

$$R(r) \sim \frac{e^{ikr}}{\sqrt{r}} \quad (0.0.17)$$

であることを示せ. ここで, $k \equiv \sqrt{2mE}/\hbar$ である.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(r, \theta) = E\psi(r, \theta) \quad (0.0.18)$$

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) + V(r) \right] \psi(r, \theta) = E\psi(r, \theta) \quad (0.0.19)$$

$\psi(r, \theta) = R(r)\Theta(\theta)$ とし, 上式を整理すると

$$\frac{r^2}{R(r)} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} R(r) \right) - \frac{r}{R(r)} \left(\frac{\partial}{\partial r} R(r) \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} (V(r) - E) - \frac{1}{\Theta(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \Theta(\theta) = 0 \quad (0.0.20)$$

となる.

$$-\frac{1}{\Theta(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \Theta(\theta) = j^2 \quad (0.0.21)$$

とすれば

$$\Theta(\theta) = e^{ij\theta} \quad (0.0.22)$$

が得られる. さらに,

$$\Theta(\theta) = \Theta(\theta + 2\pi) \quad (0.0.23)$$

だから j は整数であることがわかる. よって r に関する部分は

$$\frac{r^2}{R(r)} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} R(r) \right) - \frac{r}{R(r)} \left(\frac{\partial}{\partial r} R(r) \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} (V(r) - E) = -j^2 \quad (0.0.24)$$

である. 整理すると

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} R(r) - \frac{\hbar^2}{2mr} \frac{\partial}{\partial r} R(r) + (V(r) - E)R(r) + \frac{\hbar^2 j^2}{2mr^2} R(r) = 0 \quad (0.0.25)$$

である. これは式 (0.0.16) に $u = \sqrt{r}R$ を代入した式と同一である. よって波動関数は

$$\psi(r, \theta) = R(r)e^{ij\theta} \quad (0.0.26)$$

と表されることがわかる. ただし, j は整数, $u = \sqrt{r}R$ が

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(j^2 - 1/4)}{r^2} \right] u = Eu \quad (0.0.27)$$

を満たすとする.

式 (0.0.16) で $r \rightarrow \infty$ とすれば

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{du^2} = Eu \quad (0.0.28)$$

であるため,

$$R(r) = \frac{u}{\sqrt{r}} = \frac{e^{ikr}}{\sqrt{r}} \quad (0.0.29)$$

であることがわかる。

以上の結果は 2 次元の散乱問題の境界条件が

$$\psi(r, \theta) \simeq e^{ikx} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{\sqrt{r}}, \text{ for } r \rightarrow \infty \quad (0.0.30)$$

であることを示唆している。また、2 次元の部分波展開は Hankel 関数 $H^{(1)}$ を用いて、

$$\psi(r, \theta) = e^{ikx} + \sum_j c_j H_j^{(1)}(kr) e^{ij\theta} \quad (0.0.31)$$

となる。

例題 0.1: Griffith example11.2

Fermi の黄金律を用いてポテンシャル $V(\mathbf{r})$ に対する散乱断面積を求めよ。

初期状態と終状態はそれぞれ入射波と散乱波であるため

$$\psi_i = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (0.0.32)$$

$$\psi_f = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \quad (0.0.33)$$

と表される。ここで、規格化のために周期 L の周期的境界条件を課した。また、この周期的境界条件により、

$$\mathbf{k}' = \frac{2\pi}{L} (n_x \mathbf{e}_x + n_y \mathbf{e}_y + n_z \mathbf{e}_z) \quad (0.0.34)$$

が得られる。 n_x, n_y, n_z は整数である。散乱体のポテンシャル $V(\mathbf{r})$ を摂動として取り入れると

$$\langle f | \hat{V} | i \rangle = \int \psi_f^* V(\mathbf{r}) \psi_i d\mathbf{r} = \frac{1}{L^3} \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (0.0.35)$$

を得る。

次に、状態密度を決定する。エネルギーが $[E, E + dE]$ の状態は、厚さ k 、立体角 $d\Omega$ の球殻の中に

$$\frac{k^2 dk d\Omega}{(2\pi/L)^3} \quad (0.0.36)$$

個含まれている。よって、

$$\rho(E) dE = \frac{k^2 dk d\Omega}{(2\pi/L)^3} = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 k^2 \frac{dk}{dE} dE d\Omega \quad (0.0.37)$$

$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ なので、

$$\rho(E) = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \frac{\sqrt{2m^3 E}}{\hbar^3} d\Omega \quad (0.0.38)$$

が得られる。よって、Fermi の黄金律から、単位時間に立体角 $d\Omega$ に粒子が到達する確率は

$$\omega_{i \rightarrow d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{L^6} \left| \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right|^2 \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \frac{\sqrt{2m^3 E_f}}{\hbar^3} d\Omega \quad (0.0.39)$$

である。さらに、

$$\sigma d\Omega = \frac{(\text{単位時間に立体角 } d\Omega \text{ に粒子が到達する確率})}{(\text{単位時間単位面積あたりに粒子が入射する確率})} \quad (0.0.40)$$

であり、分子は入射波の確率の流れである。これは

$$J = \frac{1}{L^3} \frac{\hbar k}{m} \quad (0.0.41)$$

である。以上より、散乱断面積

$$\sigma = \frac{\omega_{i \rightarrow d\Omega}}{J d\Omega} = \left| -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right|^2 \quad (0.0.42)$$

が得られる。これは第 1Born 近似で得られた式と同一である。