近似法の一つである部分波展開を扱う．まず，半古典論を用いて散乱が起こる条件から，方位量子数 l ごとに波動関数を展開して，l が小さい波動関数のみ考えればよいことが分かる．次に，波動関数の基底展開について議論を行う．関数空間には様々な直交基底が存在するが，今回は Legendre 多項式を基底に取る．最後に，展開に用いた未定係数を用いて，散乱断面積や全断面積をその未定係数を用いて表す．

0.0.1 散乱の条件

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,

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

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,

$$\begin{aligned}
|\boldsymbol{L}| &= |\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}| && (0.0.7)\\
&= pb && (0.0.8)
\end{aligned}$$

である．散乱体を半径 a の球とすると，衝突の条件は

$$\begin{aligned}
b &< a && (0.0.9)\\
L/p &< a && (0.0.10)\\
L &< pa && (0.0.11)
\end{aligned}$$

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 に属する固有関数で展開し，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．

0.0.2 波動関数の基底展開

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]ことを考える．最初に，以下で扱う演算子のクラスである Strum-Liouvillle 演算子についての性質を調べる．まず，Legendre 多項式と Legendre 陪多項式の性質を調べて，直交性を知る．次に，Legendre 多項式を用いて波動関数を展開して，展開係数 B_{ml} が満たすべき微分方程式を導く．続いて，Bessel 微分方程式の解である Bessel 関数の表式を求めて，球 Bessel 関数と球 Neumann 関数，球 Hankel 関数を定義する．最後に，展開係数 B_{ml} が球 Bessel 関数と球 Neumann 関数の線型結合で書けることを確かめて，線型結合の係数が波動関数を特徴づけるものだと知る．

[1] ここから**式** (0.0.70) までは飛ばしても良い．

0.0.2.1 Strum-Liouvillle 演算子の Hermite 性

$a < b$ として，$x \in [a, b]$ で定義された関数空間 V を考える．$\rho(x)$ を非負の実数関数として，$f, g \in V$ に対して，

$$\langle f, g \rangle \coloneqq \int_a^b f^*(x) g(x) \rho(x) \, \mathrm{d}x \tag{0.0.15}$$

なる内積を入れる．関数空間 V 上の演算子として $\mathcal{L}$ を，

$$\mathcal{L} \coloneqq \frac{1}{\rho(x)} \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left\{ p(x) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \right\} + q(x) \right] \tag{0.0.16}$$

とする．**式** (0.0.16) なる形をした演算子を Strum-Liouvillle 演算子という．境界条件を，$\forall f \in V$ について，

$$\begin{cases} f(a) = f(b) \\ p(a) f'(a) = p(b) f'(b) \end{cases} \tag{0.0.17}$$

とすると，

$$\langle f, \mathcal{L} g \rangle = \langle \mathcal{L} f, g \rangle \tag{0.0.18}$$

が成立する．**式** (0.0.18) なる関係が成り立つ演算子 $\mathcal{L}$ を Hermite 演算子という．

Proof. 内積の定義より，

$$\begin{aligned}
\langle f, \mathcal{L} g \rangle &= \int_a^b f^*(x) \frac{1}{\rho(x)} \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left\{ p(x) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} g(x) \right\} + q(x) g(x) \right] \rho(x) \, \mathrm{d}x & (0.0.19) \\
&= \int_a^b f^*(x) \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left\{ p(x) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} g(x) \right\} + q(x) g(x) \right] \mathrm{d}x & (0.0.20) \\
&= \left[f^*(x) g'(x) \right]_a^b - \int_a^b f'^*(x) p(x) g'(x) \, \mathrm{d}x + \int_a^b f^*(x) q(x) g(x) \, \mathrm{d}x & (0.0.21) \\
&= \left[f^*(x) p(x) g'(x) \right]_a^b - \left[f'^*(x) p(x) g(x) \right]_a^b + \int_a^b g(x) \frac{1}{\rho(x)} \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left(p(x) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} f^*(x) \right) + q(x) f^*(x) \right] \rho(x) \, \mathrm{d}x & (0.0.22) \\
&= \left[f^*(x) p(x) g'(x) \right]_a^b - \left[f'^*(x) p(x) g(x) \right]_a^b + \langle g, \mathcal{L} f \rangle^* & (0.0.23) \\
&= \left[f^*(x) p(x) g'(x) \right]_a^b - \left[g(x) p(x) f'^*(x) \right]_a^b + \langle \mathcal{L} f, g \rangle & (0.0.24)
\end{aligned}$$

となる．第 1 項と第 2 項について，第 1 項に $f(a) = f(b)$ を，第 2 項に $p(x)$ が実数値関数であり $p(a) f'(a) = p(b) f'(b)$ であることを用いると

$$\left[f^*(x) p(x) g'(x) \right]_a^b - \left[f'^*(x) p(x) g(x) \right]_a^b = \{ p(b) g'(b) - p(a) f(a) \} f^*(a) - \{ g(b) - g(a) \} p(a) f'(a) \tag{0.0.25}$$

を得る．今度は，第 1 項に $p(x)$ が実数値関数であり $p(a) g'(a) = p(b) g'(b)$ であることを，第 2 項に $g(a) = g(b)$ を用いれば，

$$\langle f, \mathcal{L} g \rangle = \langle \mathcal{L} f, g \rangle \tag{0.0.26}$$

を得る． □

0.0.2.2 Legendre 多項式

式 (0.0.16) において，$a = -b = 1$ とする．また，

$$\begin{aligned}
\rho(x) &\coloneqq 1 & (0.0.27) \\
p(x) &\coloneqq 1 - x^2 & (0.0.28) \\
q(x) &\coloneqq -\frac{m^2}{1 - x^2}, \ m \in \{0, 1, \cdots\} & (0.0.29)
\end{aligned}$$

とすると,

$$\mathcal{L}_m = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left\{(1-x^2)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right\} - \frac{m^2}{1-x^2} \tag{0.0.30}$$

となる．関数の内積は,

$$\langle f, g\rangle = \int_{-1}^{1} f^*(x)g(x)\,\mathrm{d}x \tag{0.0.31}$$

と定義しておく．また，境界条件は,

$$p(\pm1)f^*(\pm1)g'(\pm1) = 0 \tag{0.0.32}$$

とする．これより，演算子 $\mathcal{L}$ が Hermite 演算子であると確かめられる．たとえば，$g'(x) = p(x)$ となるように $g(x)$ を定めれば，$f(1) = f(-1) = 0$ となる．また，$f(x) = 1$ となるように $f(x)$ を定めれば，$p(1)g'(1) = p(-1)g'(1) = 0$ となるので，前節で示した境界条件を満足する．さて，Legendre 多項式 $P_n(x)$ は n を非負整数として,

$$\mathcal{L}_0 P_n(x) = -n(n+1)P_n(x) \tag{0.0.33}$$

$$\Leftrightarrow \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left\{(1-x^2)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}P_n(x)\right\} = -n(n+1)P_n(x) \tag{0.0.34}$$

なる $P_n(x)$ のうち，$x = 0$ 周りで級数展開したもので,

$$P_n(x) = \sum_{j=0}^{\infty} u_j x^j \tag{0.0.35}$$

と書いたとき,

$$u_n = \frac{(2n)!}{2^n(n!)^2} \tag{0.0.36}$$

$$u_{n+1} = 0 \tag{0.0.37}$$

なるものである．**式** (0.0.35) を**式** (0.0.34) に代入すると,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left\{(1-x^2)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\sum_{j=0}^{\infty} u_j x^j\right\} = -n(n+1)\sum_{j=0}^{\infty} u_j x^j \tag{0.0.38}$$

$$\Leftrightarrow \sum_{j=0}^{\infty} j u_j \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(x^{j-1} - x^{j+1}\right) = -n(n+1)\sum_{j=0}^{\infty} u_j x^j \tag{0.0.39}$$

$$\Leftrightarrow \sum_{j=0}^{\infty} j(j-1)u_j x^{j-2} - \sum_{j=0}^{\infty} j(j+1)u_j x^j = -n(n+1)\sum_{j=0}^{\infty} u_j x^j \tag{0.0.40}$$

$$\Leftrightarrow \sum_{j=0}^{\infty} j(j-1)u_j x^{j-2} = \sum_{j=0}^{\infty} u_j[j(j+1) - n(n+1)]x^j \tag{0.0.41}$$

$$\Leftrightarrow \sum_{j=2}^{\infty} j(j-1)u_j x^{j-2} = \sum_{j=0}^{\infty} u_j[j(j+1) - n(n+1)]x^j \tag{0.0.42}$$

$$\Leftrightarrow \sum_{j=0}^{\infty} (j+1)(j+2)u_{j+2} x^j = \sum_{j=0}^{\infty} u_j[j(j+1) - n(n+1)]x^j \tag{0.0.43}$$

となるから,

$$(j+1)(j+2)u_{j+2} = [j(j+1) - n(n+1)]u_j \tag{0.0.44}$$

なる漸化式が成立する．**式** (0.0.44) において $j=n$ を代入すると，$u_{n+2}=0$ となる．また，$j=n+1$ を代入すると **式** (0.0.37) より $u_{n+1}=0$ である．よって，

$$0=u_{n+1}=u_{n+2}=u_{n+3}=u_{n+4}=\cdots \tag{0.0.45}$$

となる．また，**式** (0.0.44) に $j=n-2$ を代入すると，

$$u_{n-2}=-\frac{n(n-1)}{2(2n-1)}u_n \tag{0.0.46}$$

となる．よって，**式** (0.0.36) と **式** (0.0.46) を用いて **式** (0.0.35) を表すと，

$$\begin{aligned}P_n(x)&=\frac{(2n)!}{2^n(n!)^2}\left[x^n-\frac{n(n-1)}{2(2n-1)}x^{n-2}+\frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2\cdot4\cdot(2n-1)(2n-3)}x^{n-4}+\cdots\right] &(0.0.47)\\ &=\sum_{s=0}^{\lfloor n/2\rfloor}(-1)^s\frac{(2n-2s)!}{2^ns!(n-s)!(n-2s)!}x^{n-2s} &(0.0.48)\end{aligned}$$

となる．なお，Legendre 多項式は，

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\left(x^2-1\right)^n&=\sum_{s=0}^{n}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(-1)^s\binom{n}{k}x^{2n-2k} &(0.0.49)\\ &=\sum_{s=0}^{\lfloor n/2\rfloor}(-1)^s\frac{n!}{s!(n-s)!}\frac{(2n-2s)!}{(n-2k)!} &(0.0.50)\end{aligned}$$

なる関係を用いると，

$$P_n(x)=\frac{1}{2^nn!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\left(x^2-1\right)^n \tag{0.0.51}$$

となる．

0.0.2.3 Legendre 陪多項式

Legendre 陪多項式 $P_n^m(x)$ は $m\le n$ として，**式** (0.0.51) を用いれば，

$$\begin{aligned}P_n^m(x)&:=\left(1-x^2\right)^{m/2}\frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m}P_n(x) &(0.0.52)\\ &=\left(1-x^2\right)^{m/2}\frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m}\frac{1}{2^nn!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\left(x^2-1\right)^n &(0.0.53)\\ &=\frac{1}{2^nn!}\left(1-x^2\right)^{m/2}\frac{\mathrm{d}^{n+m}}{\mathrm{d}x^{n+m}}\left(x^2-1\right)^n &(0.0.54)\end{aligned}$$

となる．Legendre 陪多項式の直交性は $\mathcal{L}_m$ が Hermite 演算子であり，その固有関数である $P_n^m(x)$ が直交することより従う．自分自身との内積，つまり，$\langle P_n^m(x),P_n^m(x)\rangle$ の値を計算する．**式** (0.0.54) を用いて，**式** (0.0.31) で示した内積の定義に従って計算すると，

$$\begin{aligned}\langle P_n^m(x),P_n^m(x)\rangle&=\int_{-1}^{1}\frac{1}{2^{2n}(n!)^2}\left(1-x^2\right)^m\left\{\frac{\mathrm{d}^{n+m}}{\mathrm{d}x^{n+m}}\left(x^2-1\right)^m\right\}\left\{\frac{\mathrm{d}^{n+m}}{\mathrm{d}x^{n+m}}\left(x^2-1\right)^m\right\}\mathrm{d}x &(0.0.55)\\ &=\frac{1}{2^{2n}(n!)^2}\int_{-1}^{1}\left(1-x^2\right)^m\left\{\frac{\mathrm{d}^{n+m}}{\mathrm{d}x^{n+m}}\left(x^2-1\right)^m\right\}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left\{\frac{\mathrm{d}^{n+m-1}}{\mathrm{d}x^{n+m-1}}\left(x^2-1\right)^m\right\}\mathrm{d}x &(0.0.56)\\ &=\frac{1}{2^{2n}(n!)^2}\left[\left(1-x^2\right)^m\left\{\frac{\mathrm{d}^{n+m}}{\mathrm{d}x^{n+m}}\left(x^2-1\right)^m\right\}\left\{\frac{\mathrm{d}^{n+m-1}}{\mathrm{d}x^{n+m-1}}\left(x^2-1\right)^m\right\}\right]_{-1}^{1} &(0.0.57)\\ &\quad-\frac{1}{2^{2n}(n!)^2}\int_{-1}^{1}\left\{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(1-x^2\right)^m\left\{\frac{\mathrm{d}^{n+m}}{\mathrm{d}x^{n+m}}\left(x^2-1\right)^n\right\}\right\}\left\{\frac{\mathrm{d}^{n+m+1}}{\mathrm{d}x^{n+m+1}}\left(x^2-1\right)^m\right\}\mathrm{d}x &(0.0.58)\\ &=-\frac{1}{2^{2n}(n!)^2}\int_{-1}^{1}\left\{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(1-x^2\right)^m\left\{\frac{\mathrm{d}^{n+m}}{\mathrm{d}x^{n+m}}\left(x^2-1\right)^n\right\}\right\}\left\{\frac{\mathrm{d}^{n+m+1}}{\mathrm{d}x^{n+m+1}}\left(x^2-1\right)^m\right\}\mathrm{d}x &(0.0.59)\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \cdots \qquad (0.0.60)\\
&= \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n}(n!)^2}\int_{-1}^{1}\left(x^2-1\right)^n\left\{\frac{\mathrm{d}^{n+m}}{\mathrm{d}x^{n+m}}\left(1-x^2\right)^m\left\{\frac{\mathrm{d}^{n+m}}{\mathrm{d}x^{n+m}}\left(x^2-1\right)^n\right\}\right\}\mathrm{d}x \qquad (0.0.61)\\
&= \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n}(n!)^2}\int_{-1}^{1}\left(x^2-1\right)^n\left[\sum_{k=0}^{n+m}\binom{n+m}{k}\left\{\frac{\mathrm{d}^{n+m-k}}{\mathrm{d}x^{n+m-k}}\left(1-x^2\right)^m\right\}\left\{\frac{\mathrm{d}^{n+m+k}}{\mathrm{d}x^{n+m+k}}\left(x^2-1\right)^n\right\}\right]\mathrm{d}x \qquad (0.0.62)
\end{aligned}
$$

となる．最終行で Leibniz の公式を用いた．**式** (0.0.62) の和の中の $n+m-k$ 階微分と $n+m-k$ 階微分を考える．$\left(1-x^2\right)^m$ と $(x^2-1)^n$ の最高次数は，それぞれ $2m$ と $2n$ であるから，$2m \geq n+m-k$ かつ $2n \geq n+m+k$ なる k でのみ和の中は 0 でなくなる．つまり，$n-m \leq k$ かつ $n-m \geq k$ なる k は $k=n-m$ のみである．よって，**式** (0.0.62) は，

$$
\begin{aligned}
\langle P_n^m(x), P_n^m(x)\rangle &= \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n}(n!)^2}\int_{-1}^{1}\left(x^2-1\right)^n\left[\sum_{k=0}^{n+m}\binom{n+m}{k}\left\{\frac{\mathrm{d}^{n+m-k}}{\mathrm{d}x^{n+m-k}}\left(1-x^2\right)^m\right\}\left\{\frac{\mathrm{d}^{n+m+k}}{\mathrm{d}x^{n+m+k}}\left(x^2-1\right)^n\right\}\right]\mathrm{d}x \qquad (0.0.63)\\
&= \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n}(n!)^2}\int_{-1}^{1}\left(x^2-1\right)^n\left[\binom{n+m}{n-m}\left\{\frac{\mathrm{d}^{2m}}{\mathrm{d}x^{2m}}\left(1-x^2\right)^m\right\}\left\{\frac{\mathrm{d}^{2n}}{\mathrm{d}x^{2n}}\left(x^2-1\right)^n\right\}\right]\mathrm{d}x \qquad (0.0.64)\\
&= \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n}(n!)^2}(-1)^m(2m)!(2n)!\frac{(n+m)!}{(n-m)!(2m)!}\int_{-1}^{1}\left(x^2-1\right)^n\mathrm{d}x \qquad (0.0.65)\\
&= \frac{(-1)^{n+m}}{2^{2n}(n!)^2}(-1)^m(2m)!(2n)!\frac{(n+m)!}{(n-m)!(2m)!}(-1)^n 2\frac{(2n)!!}{(2n+1)!!} \qquad (0.0.66)\\
&= \frac{2}{2n+1}\frac{(n+m)!}{(n-m)!} \qquad (0.0.67)
\end{aligned}
$$

となる．Legendre 多項式の直交性とまとめて書くと，

$$
\langle P_{n'}^m(x), P_n^m(x)\rangle = \delta_n^{n'}\frac{2}{2n+1}\frac{(n+m)!}{(n-m)!} \qquad (0.0.68)
$$

となる．

0.0.2.4　Bessel の微分方程式

0.0.2.5　Legendre 陪多項式の基底展開

0.0.2.6　球 Bessel 関数と球 Neumann 関数

したがって，部分波展開した散乱の波動関数は

$$
\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{i}^l j_l(kr)P_l(\cos\theta) + \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)a_l P_l(\cos\theta)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \qquad (0.0.69)
$$

である．

部分波展開した散乱の波動関数

$$
\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{i}^l j_l(kr)P_l(\cos\theta) + \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)a_l P_l(\cos\theta)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \qquad (0.0.70)
$$

0.0.3　散乱断面積と全断面積

部分波展開した波動関数より計算した散乱断面積は,

$$
\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 \qquad (0.0.71)
$$

$$= \sum_{l} \sum_{l'} (2l+1)(2l'+1) a_l^* a_{l'} P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) \tag{0.0.72}$$

である．全断面積は

$$\sigma^{\mathrm{tot}} = 2\pi \int \sigma(\theta) \sin\theta \, \mathrm{d}\theta \tag{0.0.73}$$

$$= 2\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)^2 |a_l|^2 \left(\frac{2}{2l+1} \right) \tag{0.0.74}$$

$$= 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |a_l|^2 \tag{0.0.75}$$

である．ここで，Legendre 多項式の直交性

$$\int_0^{\pi} P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) \sin\theta \, \mathrm{d}\theta = \frac{2}{2l+1} \delta_{l,l'} \tag{0.0.76}$$

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．