散乱体が球対称ポテンシャル $V(r)$ を持つとする．Schrödinger 方程式は以下のようになる．

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right)\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{0.0.1}$$

ここで，$V(r)$ は $r \to \infty$ で十分早く $V \to 0$ となるとする．z 軸に沿う入射波は平面波なので

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

と表せる．また，散乱波は外向きの球面波となるので

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

である．散乱問題とは，$\to\infty$ で

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} + f(\theta)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \tag{0.0.4}$$

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

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

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．

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\rho &= \frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) && (0.0.6)\\
&= \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi + \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} && (0.0.7)\\
&= -\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\psi^*\psi + \psi^*\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\psi && (0.0.8)\\
&= \frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\left[(\nabla^2\psi^*)\psi - \psi^*(\nabla^2\psi)\right] && (0.0.9)\\
&= -\frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) && (0.0.10)
\end{aligned}$$

ここで，確率流密度を

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{j} &= \frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) && (0.0.11)\\
&= \frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}(\psi^*\nabla\psi) && (0.0.12)
\end{aligned}$$

と定義すれば，確率密度に対する連続の式

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho = -\nabla\cdot\boldsymbol{j} \tag{0.0.13}$$

を得る[1]．

次に微分断面積と散乱振幅の関係を考える．入射波は $\psi_{\mathrm{in}} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}$ である．入射波の確率流密度は

$$\begin{aligned}
j_z &= \frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kz}\mathrm{i}ke^{\mathrm{i}kz}) && (0.0.14)\\
&= \frac{\hbar k}{m} && (0.0.15)
\end{aligned}$$

[1]両辺に電荷をかければ電荷保存の法則となる．

である．散乱波は $\psi_{\mathrm{sc}} = \dfrac{f(\theta)}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}$ である．散乱波の確率流密度は

$$\begin{aligned} j_r(\theta) &= \frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}(\psi_{\mathrm{sc}}^* \nabla \psi_{\mathrm{sc}}) && (0.0.16)\\ &\simeq \frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}(\psi_{\mathrm{sc}}^* \frac{\partial}{\partial r}\psi_{\mathrm{sc}}) && (0.0.17)\\ &= \frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}\left[\frac{f(\theta)}{r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}\left(\frac{\mathrm{i}k}{r} - \frac{1}{r^2}\right) f(\theta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}\right] && (0.0.18)\\ &\simeq \frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}\left[\frac{f(\theta)}{r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}\frac{\mathrm{i}k}{r} f(\theta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}\right] && (0.0.19)\\ &= \frac{\hbar}{m}\frac{k}{r^2}|f(\theta)|^2 && (0.0.20)\\ &= \frac{|f(\theta)|^2}{r^2} j_z && (0.0.21) \end{aligned}$$

である．ここで，1 行目から 2 行目では

$$\begin{aligned} \nabla\psi_{\mathrm{sc}} &= \left(\frac{\partial}{\partial r}\boldsymbol{e}_r + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}\boldsymbol{e}_\theta + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi}\boldsymbol{e}_\phi\right)\psi_{\mathrm{sc}} && (0.0.22)\\ &\simeq \frac{\partial}{\partial r}\psi_{\mathrm{sc}}\boldsymbol{e}_r \ (r \to \infty) && (0.0.23) \end{aligned}$$

という近似を用いた．

微分断面積と粒子数の関係

$$\mathrm{d}N = \sigma(\theta) N \,\mathrm{d}\Omega \tag{0.0.24}$$

の両辺を N で割る．

$$\frac{\mathrm{d}N}{N} = \sigma(\theta)\,\mathrm{d}\Omega \tag{0.0.25}$$

上式の左辺を言葉に直すと，

$$\frac{\text{単位時間に位置 }(r,\theta)\text{ にある }\mathrm{d}S\text{ に入射する粒子数}}{\text{単位時間単位面積当たりの入射粒子数}} \tag{0.0.26}$$

である．これは

$$\frac{\text{単位時間に位置 }(r,\theta)\text{ にある }\mathrm{d}S\text{ に粒子が入射する確率}}{\text{単位時間単位面積当たりに粒子が入射する確率}} = \frac{j_z\,\mathrm{d}S}{j_z} \tag{0.0.27}$$

と等しいので

$$\sigma(\theta)\,\mathrm{d}\Omega = \frac{|f(\theta)|^2\,\mathrm{d}S}{r^2} \tag{0.0.28}$$

が得られる．よって，$\mathrm{d}\Omega = \dfrac{\mathrm{d}S}{r^2}$ だから，

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 \tag{0.0.29}$$

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

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 \tag{0.0.30}$$

次に $f(\theta)$ を求めるための式を作る．散乱の Schrödinger 方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(r)\right)\psi(\boldsymbol{r})=E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{0.0.31}$$

である．ここで，

$$\begin{cases}\kappa=\dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\\ U(\boldsymbol{r})=\dfrac{2m}{\hbar^2}V(\boldsymbol{r})\end{cases} \tag{0.0.32}$$

とおくと，

$$\left(\nabla^2+\kappa^2\right)\psi(\boldsymbol{r})=U(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) \tag{0.0.33}$$

と表せる．式 (**??**) の解は，

$$\left(\nabla^2+\kappa^2\right)\phi(\boldsymbol{r})=0 \tag{0.0.34}$$

の一般解 $\phi(\boldsymbol{r})=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}$ と

$$\left(\nabla^2+\kappa^2\right)\chi(\boldsymbol{r})=U(\boldsymbol{r})\chi(\boldsymbol{r}) \tag{0.0.35}$$

と特解 $\chi(\boldsymbol{r})$ の和である．

では，式 (0.0.35) の特解を求めよう．レシピはこうである．

1. $\left(\nabla^2+\kappa^2\right)G_0(\boldsymbol{r})=\delta(\boldsymbol{r})$ 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，

$$\left(\nabla^2+\kappa^2\right)\chi(\boldsymbol{r})=(\nabla^2+\kappa^2)\int \mathrm{d}\boldsymbol{r'}\,G_0(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'})U(\boldsymbol{r'})\phi(\boldsymbol{r'}) \tag{0.0.36}$$

$$=\int \mathrm{d}\boldsymbol{r'}\,\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'})U(\boldsymbol{r'})\phi(\boldsymbol{r'}) \tag{0.0.37}$$

$$=U(\boldsymbol{r})\phi(\boldsymbol{r}) \tag{0.0.38}$$

が成り立つためである．

Green 関数を求めよう．

$$\left(\nabla^2+\kappa^2\right)G_0(\boldsymbol{r})=\delta(\boldsymbol{r}) \tag{0.0.39}$$

の両辺を Fourier 変換する．

$$\left(\nabla^2+\kappa^2\right)\int \mathrm{d}\boldsymbol{k'}\,G_0(\boldsymbol{k'})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k'}\cdot\boldsymbol{r}}=\frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}\boldsymbol{k'}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k'}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{0.0.40}$$

$$\int \mathrm{d}\boldsymbol{k}\left(-\boldsymbol{k'}^2+\kappa^2\right)G_0(\boldsymbol{k'})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k'}\cdot\boldsymbol{r}}=\frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}\boldsymbol{k'}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k'}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{0.0.41}$$

両辺を比較すると

$$(\kappa^2-k'^2)G_0(\boldsymbol{k'})=\frac{1}{(2\pi)^2} \tag{0.0.42}$$

$$G_0(\boldsymbol{k'})=\frac{1}{(2\pi)^2(\kappa^2-k'^2)} \tag{0.0.43}$$

を得る．よって Green 関数は

$$G_0(\boldsymbol{r})=\frac{1}{(2\pi)^2}\int \mathrm{d}\boldsymbol{k'}\,\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k'}\cdot\boldsymbol{r}}}{\kappa^2-k'^2} \tag{0.0.44}$$

と表される．極座標に変換しこの積分を実行する．

$$
\begin{aligned}
G_0(\boldsymbol{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^2}\int \frac{\exp(\mathrm{i}k' r\cos\theta)}{\kappa^2 - k'^2} k'^2 \sin\theta \,\mathrm{d}\theta \,\mathrm{d}\phi \,\mathrm{d}k' && (0.0.45)\\
&= \int \frac{1}{(2\pi)^3} 2\pi \int_0^\infty k'^2 \,\mathrm{d}k' \int_0^\pi \sin\theta \,\mathrm{d}\theta \,\frac{\exp(\mathrm{i}k' r\cos\theta)}{\kappa^2 - k'^2} && (0.0.46)\\
&= \frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^\infty \frac{k'^2 \,\mathrm{d}k'}{\kappa^2 - k'^2} \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'r} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'r}}{\mathrm{i}k'r} && (0.0.47)\\
&= \frac{1}{4\pi^2 \mathrm{i}r}\int_0^\infty k' \,\mathrm{d}k' \,\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'r} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'r}}{(\kappa - k')(\kappa + k')} && (0.0.48)\\
&= \frac{1}{8\pi^2 \mathrm{i}r}\int_{-\infty}^\infty k' \,\mathrm{d}k' \,\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'r} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'r}}{(\kappa - k')(\kappa + k')} && (0.0.49)\\
&= \frac{1}{8\pi^2 \mathrm{i}r}\int_{-\infty}^\infty k' \,\mathrm{d}k' \left(\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'r}}{(\kappa - k')(\kappa + k')} - \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'r}}{(\kappa - k')(\kappa + k')}\right) && (0.0.50)\\
&= \frac{1}{8\pi^2 \mathrm{i}r}(I_1 - I_2) && (0.0.51)
\end{aligned}
$$

$$
I_1 \equiv \int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}k' \,\frac{k'\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'r}}{(\kappa - k')(\kappa + k')},\ I_2 \equiv \int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}k' \,\frac{k'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'r}}{(\kappa - k')(\kappa + k')} \tag{0.0.52}
$$

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

$$
\oint \frac{f(z)}{(z - z_0)} \,\mathrm{d}z = 2\pi\mathrm{i} f(z_0) \tag{0.0.53}
$$

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，

$$
I_1 = -\mathrm{i}\pi\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} \tag{0.0.54}
$$

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，

$$
I_2 = \mathrm{i}\pi\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} \tag{0.0.55}
$$

したがって，Green 関数は

$$
G_0(r) = -\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{4\pi r} \tag{0.0.56}
$$

となる．これは外に広がる球面波を表す．

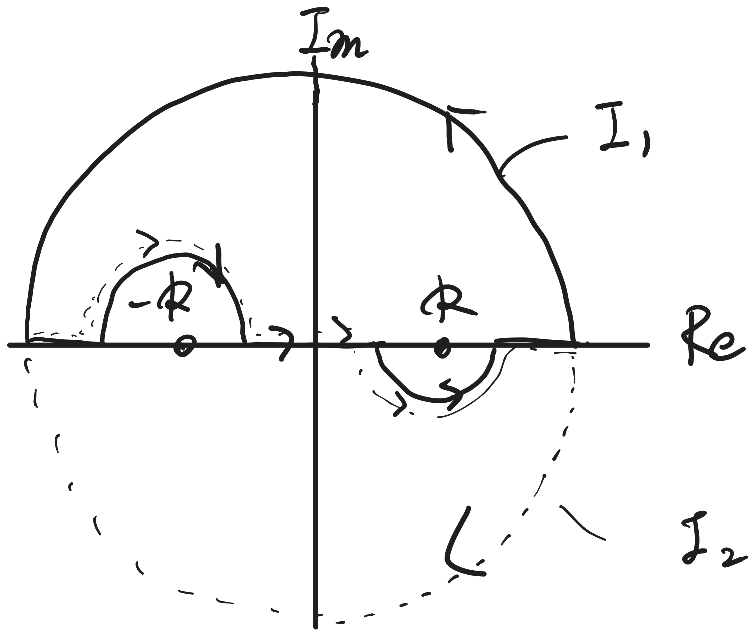

Figure 1: 積分経路

以上の計算から Schrödinger 方程式 (0.0.1) の形式解は

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} - \frac{1}{4\pi}\int \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'}|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'}|}\frac{2m}{\hbar^2}V(r')\psi(\boldsymbol{r'})\,\mathrm{d}r' \tag{0.0.57}$$

である．これは平面波と球面波の和となっている．

次に式 (0.0.57) 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 (0.0.57) において $r \gg r'$ では

$$|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'}| = \sqrt{r^2 - 2\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{r'} + r'^2} \tag{0.0.58}$$

$$= r\sqrt{1 - \frac{2\boldsymbol{r'}\cdot\boldsymbol{n}}{r + \left(\frac{r'}{r}\right)^2}} \tag{0.0.59}$$

$$\simeq r - \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r'} \tag{0.0.60}$$

が成り立つ．よって，

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'}|} \simeq \mathrm{e}^{\mathrm{i}k(r-\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r'})} \tag{0.0.61}$$

$$= \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k'}\cdot\boldsymbol{r'}} \tag{0.0.62}$$

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，

$$\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'}|} \simeq \frac{1}{r\left(1 - \frac{\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r'}}{r}\right)} \tag{0.0.63}$$

$$=\simeq \frac{1}{r} \tag{0.0.64}$$

である．以上より，

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

である．したがって，散乱振幅は

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r'}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k'}\cdot\boldsymbol{r'}}\,\frac{2m}{\hbar^2}V(r')\psi(r') \tag{0.0.66}$$

となる．