

スピンと統計性

2022年12月5日

京都大学理学部物理科学系 3 回生

原 慧人

1 同種粒子の波動関数

ここでは「2つの同種粒子の波動関数はすべて対称または反対称である」という対称化仮説を採用する。この章では、粒子の入れ替えに対して対称な多粒子系の波動関数と反対称な多粒子系の波動関数がそれぞれのよ

うに表されるかについて述べる。

1.1 2粒子系の波動関数

2粒子系の波動関数を $\psi(x_1, x_2)$ とする。この波動関数は粒子が同種粒子であることは考慮していないものとする。2粒子の間に相互作用がない場合は Hamiltonian は粒子1に関する部分と粒子2に関する部分に分けられる。従って、2粒子の波動関数は1粒子の波動関数の積で表すことができ、

$$\psi(x_1, x_2) = \phi_\alpha(x_1)\phi_\beta(x_2) \quad (1)$$

となる。ここで、 $\psi(x_1, x_2)$ は粒子1が α という状態にあって粒子2が β という状態にあるときの波動関数である。この波動関数に入れ替え演算子 P_{12} を作用させると、

$$P_{12}\psi(x_1, x_2) = P_{12}\phi_\alpha(x_1)\phi_\beta(x_2) = \phi_\beta(x_1)\phi_\alpha(x_2) = \psi(x_2, x_1) \quad (2)$$

となる。こうしてできた波動関数は、粒子2が α という状態にあって粒子1が β という状態にあるときの波動関数で、Schrödinger 方程式の解となる。ここで

$$\begin{aligned} \psi^{(S)}(x_1, x_2) &:= \psi(x_1, x_2) + \psi(x_2, x_1) = (1 + P_{12})\psi(x_1, x_2) \\ \psi^{(A)}(x_1, x_2) &:= \psi(x_1, x_2) - \psi(x_2, x_1) = (1 - P_{12})\psi(x_1, x_2) \end{aligned} \quad (3)$$

と $\psi^{(S)}(x_1, x_2)$ と $\psi^{(A)}(x_1, x_2)$ を定義する。 $\psi^{(S)}(x_1, x_2)$ と $\psi^{(A)}(x_1, x_2)$ はどちらも Schrödinger 方程式の解である。 $P_{12}^2 = 1$ となることを用いると、

$$\begin{aligned} P_{12}\psi^{(S)}(x_1, x_2) &= P_{12}(1 + P_{12})\psi(x_1, x_2) = (P_{12} + P_{12}^2)\psi(x_1, x_2) \\ &= (P_{12} + 1)\psi(x_1, x_2) = \psi^{(S)}(x_1, x_2) \\ P_{12}\psi^{(A)}(x_1, x_2) &= P_{12}(1 - P_{12})\psi(x_1, x_2) = (P_{12} - P_{12}^2)\psi(x_1, x_2) \\ &= (P_{12} - 1)\psi(x_1, x_2) = -\psi^{(A)}(x_1, x_2) \end{aligned} \quad (4)$$

なので, $\psi^{(S)}(x_1, x_2)$ と $\psi^{(A)}(x_1, x_2)$ は, それぞれ粒子の入れ替えに関して対称な波動関数と反対称な波動関数となる.

反対称な波動関数 $\psi^{(A)}(x_1, x_2)$ は

$$\psi^{(A)}(x, x) = -\psi^{(A)}(x, x) = 0 \quad (5)$$

を満たすので, 2 粒子が同じ位置に存在することはない. 位置に限らず, 一般に 2 粒子は同じ量子力学的状態を占めることはできない. この法則を Pauli の排他率という.

後述する Slater 行列を用いると

$$\psi^{(A)}(x_1, x_2) = \phi_\alpha(x_1)\phi_\beta(x_2) - \phi_\alpha(x_2)\phi_\beta(x_1) = \det \begin{pmatrix} \phi_\alpha(x_1) & \phi_\beta(x_1) \\ \phi_\alpha(x_2) & \phi_\beta(x_2) \end{pmatrix} \quad (6)$$

と書ける. 粒子の入れ替えは行の入れ替えに対応するので, 行列式の性質からも粒子の入れ替えで $\psi^{(A)}(x_1, x_2)$ の符号は反転することがわかる. また, $x_1 = x_2 = x$ のとき, 行列式の性質から $\psi^{(A)}(x, x) = 0$ となることがわかる.

$\psi^{(S)}(x_1, x_2)$ についての確率密度は

$$\begin{aligned} |\psi^{(S)}(x_1, x_2)|^2 &= |\psi(x_1, x_2) + \psi(x_2, x_1)|^2 = (\psi(x_1, x_2) + \psi(x_2, x_1))(\psi^*(x_1, x_2) + \psi^*(x_2, x_1)) \\ &= |\psi(x_1, x_2)|^2 + |\psi(x_2, x_1)|^2 + \psi(x_1, x_2)\psi^*(x_2, x_1) + \psi(x_2, x_1)\psi^*(x_1, x_2) \\ &= |\psi(x_1, x_2)|^2 + |\psi(x_2, x_1)|^2 + 2 \operatorname{Re} \psi(x_1, x_2)\psi^*(x_2, x_1) \end{aligned} \quad (7)$$

となる. 同様に, $\psi^{(A)}(x_1, x_2)$ についての確率密度は

$$|\psi^{(A)}(x_1, x_2)|^2 = |\psi(x_1, x_2)|^2 + |\psi(x_2, x_1)|^2 - 2 \operatorname{Re} \psi(x_1, x_2)\psi^*(x_2, x_1) \quad (8)$$

となる. 波動関数が粒子の入れ替えに対して対称な場合も反対称な場合も, 確率密度には干渉項 $\operatorname{Re} \psi(x_1, x_2)\psi^*(x_2, x_1)$ が含まれる.

1.2 置換と互換

n 個の文字 $1, 2, \dots, n$ を並べ替えて a_1, a_2, \dots, a_n とすることを n 文字の置換という. n 個の文字を入れ替える操作は $n!$ 通りある. 特に 2 文字の入れ替えのことを互換といい, いくつかの互換を順に行うことを互換の積という. n 文字の置換はいくつかの互換の積で表すことができる. その表し方は無数にあるが, そこに現れる互換の個数が偶数か奇数かは置換によって一意に定まる. 偶数個の互換の積で実現できる置換を偶置換といい, 奇数個の互換の積で実現できる置換を奇置換という. ここで

$$(-1)^P := \begin{cases} 1 & (\text{P が偶置換のとき}) \\ -1 & (\text{P が奇置換のとき}) \end{cases} \quad (9)$$

で $(-1)^P$ を定義する¹.

1.3 n 粒子系の波動関数

n 個の粒子を粒子 1, 粒子, \dots , 粒子 n として, P は n 個の粒子を並べ替える操作を表し, $P_{i,j}$ は粒子 i と粒子 j を入れ替える操作を表すとす.

対称な波動関数

任意の n 粒子系の波動関数 $\psi(x_1, \dots, x_n)$ に対して,

$$\psi^{(S)}(x_1, \dots, x_n) := \sum_P P\psi(x_1, \dots, x_n) \quad (10)$$

¹ $(-1)^P$ は符号数 (signature) といわれ $\operatorname{sgn}(P)$ で表されることもある.

として $\psi^{(S)}(x_1, \dots, x_n)$ を定義すると, 任意の i, j に対して

$$P_{i,j}\psi^{(S)}(x_1, \dots, x_n) = \sum_P P_{i,j}P\psi(x_1, \dots, x_n) = \sum_{P_{i,j}P} P_{i,j}P\psi(x_1, \dots, x_n) = \psi^{(S)}(x_1, \dots, x_n) \quad (11)$$

となるので, $\psi^{(S)}(x_1, \dots, x_n)$ は粒子の入れ替えに対して対称である. ただし, $\psi(x_1, \dots, x_n)$ が粒子の入れ替えに対して反対称である場合は,

$$\begin{aligned} \psi^{(S)}(x_1, \dots, x_n) &= P_{i,j}\psi^{(S)}(x_1, \dots, x_n) = \sum_P P_{i,j}P\psi(x_1, \dots, x_n) \\ &= \sum_P -P\psi(x_1, \dots, x_n) = -\psi^{(S)}(x_1, \dots, x_n) \end{aligned} \quad (12)$$

となるので, $\psi^{(S)}(x_1, \dots, x_n) = 0$ となる. 逆に, 粒子の粒子の入れ替えに対して対称な任意の波動関数 $\psi^{(S)}(x_1, \dots, x_n)$ は

$$\psi^{(S)}(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{n!} \sum_P \psi^{(S)}(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{n!} \sum_P P\psi^{(S)}(x_1, \dots, x_n) \quad (13)$$

となるので, 式 (10) のように表すことができる. 任意の n 粒子系の波動関数と, それを置換してできた波動関数 $\psi(x_1, \dots, x_n), \dots, \psi(x_n, \dots, x_1)$ の線型結合が, 粒子の入れ替えに対して対称な波動関数となるとき, その波動関数は定数倍を除いて一意に定まり, 式 (10) のようになる.

反対称な波動関数

同様に任意の n 粒子系の波動関数 $\psi(x_1, \dots, x_n)$ に対して,

$$\psi^{(A)}(x_1, \dots, x_n) := \sum_P (-1)^P P\psi(x_1, \dots, x_n) \quad (14)$$

として $\psi^{(A)}(x_1, \dots, x_n)$ を定義すると, 任意の i, j に対して

$$\begin{aligned} P_{i,j}\psi^{(A)}(x_1, \dots, x_n) &= \sum_P P_{i,j}(-1)^P P\psi(x_1, \dots, x_n) = - \sum_{P_{i,j}P} (-1)^{P_{i,j}P} P_{i,j}P\psi(x_1, \dots, x_n) \\ &= - \sum_Q (-1)^Q Q\psi(x_1, \dots, x_n) = -\psi^{(A)}(x_1, \dots, x_n) \end{aligned} \quad (15)$$

となるので, $\psi^{(A)}(x_1, \dots, x_n)$ は粒子の入れ替えに対して反対称である. ただし, $\psi(x_1, \dots, x_n)$ が粒子の入れ替えに関して対称である場合は,

$$\begin{aligned} \psi^{(A)}(x_1, \dots, x_n) &= -P_{i,j}\psi^{(A)}(x_1, \dots, x_n) = - \sum_P P_{i,j}(-1)^P P\psi(x_1, \dots, x_n) \\ &= - \sum_P (-1)^P P\psi(x_1, \dots, x_n) = -\psi^{(A)}(x_1, \dots, x_n) \end{aligned} \quad (16)$$

となるので, $\psi^{(A)}(x_1, \dots, x_n) = 0$ となる. 逆に, 粒子の粒子の入れ替えに対して反対称な任意の波動関数 $\psi^{(A)}(x_1, \dots, x_n)$ は

$$\psi^{(A)}(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{n!} \sum_P \psi^{(A)}(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{n!} \sum_P (-1)^P P\psi^{(A)}(x_1, \dots, x_n) \quad (17)$$

となるので, 式 (14) のように表すことができる. 任意の n 粒子系の波動関数と, それを置換してできた波動関数 $\psi(x_1, \dots, x_n), \dots, \psi(x_n, \dots, x_1)$ の線型結合が, 粒子の入れ替えに対して反対称な波動関数となるとき, そ

の波動関数は定数倍を除いて一意に定まり、式 (14) のようになる。
特に相互作用が小さい場合は、 n 粒子系の波動関数を 1 粒子系の波動関数の積で近似できて

$$\psi(x_1, \dots, x_n) \simeq \prod_{i=1}^n \psi_{\alpha_i}(x_i) \quad (18)$$

と書ける。ここで、 $\psi_{\alpha_i}(x_i)$ は粒子 i が α_i という状態にあるときの波動関数である。このとき、完全反対称な波動関数は

$$\psi^{(A)}(x_1, \dots, x_n) = \sum_P (-1)^{(P)} P \psi(x_1, \dots, x_n) \simeq \det \begin{pmatrix} \psi_{\alpha_1}(x_1) & \cdots & \psi_{\alpha_1}(x_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{\alpha_n}(x_1) & \cdots & \psi_{\alpha_n}(x_n) \end{pmatrix} \quad (19)$$

と表すことができる。この行列式を Slater 行列式という。ここで $\psi_{\alpha_i}(x_j)$ は粒子 j が状態 α_i にあることを表す。 $i \neq j$ のとき $\alpha_i = \alpha_j$ となると、行列式の性質から $\psi^{(A)}(x_1, \dots, x_n) = 0$ となることがわかる。すなわち、反対称な波動関数は 2 つの粒子が同じ量子力学的状態をとることを許さない。

2 電子の統計性と周期律

元素の化学的性質は原子番号によって周期的に変化する。これを周期律という。この章では、まず原子の中の電子の性質について説明する。このとき、電子が Fermion であることが重要となる。次に原子の中の原子核の性質について説明する。ここでも原子核を構成する陽子と中性子が Fermion であることが重要となる。最後に Boson の性質について説明する。

2.1 電子の性質

原子番号 Z の原子の中には、 Z 個の電子が束縛されており、それぞれの電子が原子核からの Coulomb 引力と自分以外の電子からの Coulomb 斥力を受ける。従って、1 つの電子の状態を決める問題は多体問題になってしまい、厳密解は得られない。そこで、まず原子核から受ける Coulomb 引力のみを考えたのちに、遮蔽効果について考えることで他の電子の影響を考慮する²。

原子核からの Coulomb 引力のみを考慮した場合

電子の受ける力が原子核から受ける Coulomb 引力だけの場合は、電子の状態は 4 つの量子数 n, l, l_z, m_s によって決まる。ここで、 n は主量子数で $n = 1, 2, \dots$ であり、 l は軌道角運動量で $l = 0, 1, \dots, n-1$ であり³、 (n, l) のことを軌道という。また、 l_z は角運動量の z 成分で $l_z = -l\hbar, (-l+1)\hbar, \dots, l\hbar$ であり、 m_s はスピンの向きを指定し、電子の場合は $m_s = \pm 1/2$ である。

一般に、軌道 (n, l) に対して、 l_z と m_s に対する縮退のため、電子が占めることのできる状態は $2(2l+1)$ 個ある。例えば、 $n=0$ のときは、 $l=0$ のみが許されるため、 $l_z=0, m_s = \pm 1/2$ を取りうるから $(n, l) = (0, 0)$ は 2 重に縮退している。電子は Fermion であるため、2 つ以上の同種粒子が同じ状態は取れない。従って、 $2(2l+1)$ 個より多くの電子を軌道 (n, l) に詰めることはできない。

遮蔽効果

水素型原子では、主量子数が n のときのエネルギー E_n は軌道角運動量の大きさ l によらずに

$$E_n = -\frac{mZ^2(\alpha c)^2}{2n^2}, \quad \alpha := \frac{e^2}{4\epsilon_0 \hbar c} \quad (20)$$

²電子が球対称に分布しており、着目している 1 つの電子が原子核と自分以外の電子によって生じる球対称ポテンシャルの中で運動していると近似することがある。これを中心力場の近似という。

³ $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots$ を $l = s, p, d, g, h, \dots$ と表すことがある。

となるが、多電子系では遮蔽効果を考慮する必要がある。その結果、エネルギーは主量子数 n と軌道角運動量 l の両方に依存することになる。

例えば、 $n = 3$ の場合を考えると、 s 軌道の電子は r が小さい領域に集中しているので、原子核からの引力をまともに受けるが、 p 軌道の電子は、遠心力ポテンシャル $\hbar^2 l(l+1)/(2mr^2)$ により外に押し出されるが、 s 軌道の電子によって遮蔽されて、原子核からの引力は減っている。 d 軌道の電子の原子核から受ける引力はさらに減る事になる⁴。一般に、角運動量 l の大きな軌道は、より外側の軌道となり、外側の軌道ほど遮蔽効果は大きい。電子が1つのみ存在する場合に電子が原子核から受ける Coulomb 力の大きさ F は

$$F = \frac{Ze^2}{4\epsilon_0 r^2} \propto e^2 \quad (21)$$

となるので、Coulomb 引力が遮蔽されることは有効電荷が小さくなることと解釈できる。従って、式 (20) より l の大きな軌道はエネルギーが大きくなり、エネルギーの n についての縮退がとける。

軌道とエネルギー準位の関係

[1] によると、 $n+l$ が大きい軌道ほどエネルギー準位が大きくなり、 $n+l$ が同じ軌道は n が大きい軌道の方がエネルギーは大きいことが経験的にわかっている。そこで、原子のエネルギー順序の観測される順序を、エネルギーの小さい方から順に左から並べると表 1 のようになる。二重線は比較的エネルギー差が大きい部分を表しており、軌道角運動量 l が $l=0$ になるところでエネルギー差が大きくなることがわかる。また、 $2(2l+1)$ は各軌道の収容可能電子数である。各グループごとに分けて収容可能電子数をまとめたものが、教科書の表 15.1 である。第 N 周期の収容可能電子数は

$$N = \begin{cases} 2m & (N \text{ が偶数のとき}) \\ 2m-1 & (N \text{ が奇数のとき}) \end{cases} \quad (22)$$

とすると、 $2(m+1)^2$ となっていることがわかる。この性質は、第 N 周期のうち、最もエネルギー準位が小さい軌道は $(N, 0)$ であるとすれば簡単に示すことができる。

各グループの収容可能な電子の数まで電子が詰まると極めて安定な状態となり電子配置を変えるのに大きなエネルギーを必要となるため、原子番号 2, 10, 18, 36, 54, 86 の原子 He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn が安定な希ガス元素となるのはこのためである。このように最外殻に存在する電子の数で化学的性質の多くが決まるので、周期表により元素の分類ができる。

表 1: 軌道とエネルギーの順序と収容可能電子数の関係

| 軌道 | 1S | 2S | 2P | 3S | 3P | 4S | 3D | 4P | 5S | 4D | 5P | 6S | 4F | 5D | 6P |
|-----------|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| $n+l$ | 1 | 2 | 3 | 3 | 4 | 4 | 5 | 5 | 5 | 6 | 6 | 6 | 7 | 7 | 7 |
| $2(2l+1)$ | 2 | 2 | 6 | 2 | 6 | 2 | 10 | 6 | 2 | 10 | 6 | 2 | 14 | 10 | 6 |

2.2 原子核の性質

原子核の中の陽子の数のことを原子番号といい、原子核の中の陽子と中性子の数の和を質量数という。原子核の性質は原子番号と質量数により周期的に変化する。すなわち、中性子または陽子の数が

$$2, 8, 20, 28, 50, 82, 126 \quad (23)$$

に一致すると、原子核の結合エネルギーは突然大きくなる。これらの数を魔法数 (magic number) という。これは原子の中の電子配置が閉殻構造となるとときに原子が特に安定になる現象と似ている。魔法数は、原子核内部では核力という強い相互作用の結果、平均的な場として球対称な引力ポテンシャルを形成されており、それぞれの核子はその場の中をある程度自由に運動していると考えられる⁵。

⁴Gauss の法則より、電子の球対称分布を仮定すれば、 s 軌道の電子の受ける引力に p 軌道の電子や d 軌道の電子は影響しない。同様に、 p 軌道の電子の受ける引力にも d 軌道の電子は影響しない。

⁵[1] によると引力ポテンシャルとして調和振動子型ポテンシャルや井戸型ポテンシャルを仮定しても魔法数 (2, 8, 20, 28, 50, 82, 126) を導くことはできない。核子は短距離型ポテンシャルの中で運動しており、同時に強いスピン軌道力が働いていると仮定することで魔法数は説明できる。

2.3 Boson の性質

Boson は Bose-Einstein 統計に従い、複数の同種粒子が同じ状態をとることができる。マクロな数の Boson が 1 つの状態に入ることを Bose-Einstein 凝縮という。例えば、陽子 2 つ、中性子 2 つ、電子 2 つからなるヘリウム 4 は偶数個の Fermion からなるので Boson であり、極低温で Bose-Einstein 凝縮を起こし、超流動現象が生じる。

3 同種粒子の衝突

この章では、対称化仮説が同種粒子の衝突に及ぼす影響について述べる。具体的には、波動関数が対称な場合と反対称な場合についての散乱振幅と微分散乱断面積を求めた後、陽子の微分散乱断面積の具体的な表示を求める。

3.1 パリティ変換

3次元の位置座標 \mathbf{r} の符号を反転させる操作 $\mathbf{r} \mapsto -\mathbf{r}$ について考える。これをパリティ変換という。球面座標 (r, θ, ϕ) と直交座標 (x, y, z) には

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \phi, & y &= r \sin \theta \sin \phi, & z &= r \cos \theta \\ r &= \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, & \tan \theta &= \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z}, & \cos \phi &= \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}}, & \sin \phi &= \frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}} \end{aligned} \quad (24)$$

という関係があるので、図 1 から分かるように、パリティ変換は球面座標では

$$r \mapsto r' = r, \quad \theta \mapsto \theta' = \pi - \theta, \quad \phi \mapsto \phi' = \phi + \pi \quad (25)$$

と表される⁶。

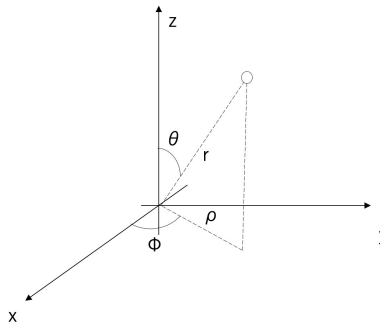


図 1: 球面座標と直交座標

3.2 同種の 2 粒子からなる波動関数

まず、スピンの 0 であるか、波動関数のスピン依存性を無視できる場合を考える。2 粒子の重心座標を \mathbf{R} 、相対座標を \mathbf{r} とする。2 粒子の座標をそれぞれ $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ とすると

$$\mathbf{R} = \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \quad (26)$$

⁶ ϕ の動く範囲は $0 \leq \phi < 2\pi$ だが、 ϕ' の動く範囲は $\pi \leq \phi' < 3\pi$ となる。 $\pi \leq \phi < 2\pi$ のとき $\phi' = \phi - \pi$ 、 $0 \leq \phi < \pi$ のとき $\phi' = \phi + \pi$ とすると、 ϕ' の動く範囲を $0 \leq \phi' < 2\pi$ とできる。

なので、粒子の入れ替えによって

$$\mathbf{R} \mapsto \mathbf{R}, \quad \mathbf{r} \mapsto -\mathbf{r} \quad (27)$$

となる。すなわち、粒子の入れ替えに関して、重心座標は不変だが、相対座標の符号は逆転する。従って、粒子の入れ替えに関して対称な関数は

$$\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \psi(\mathbf{R}, -\mathbf{r}) \quad (28)$$

となり、反対称な関数は

$$\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = -\psi(\mathbf{R}, -\mathbf{r}) \quad (29)$$

となる。

2粒子の座標の正準共役量をそれぞれ \mathbf{p}_1 と \mathbf{p}_2 として、重心座標 \mathbf{R} と相対座標 \mathbf{r} の正準共役量をそれぞれ \mathbf{P} と \mathbf{p} とすると

$$\mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \quad \mathbf{p} = \frac{1}{2}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \quad (30)$$

となり、Hamiltonian は

$$H = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} + V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(|\mathbf{r}|) \quad (31)$$

となり、重心運動に関するものと相対運動に関するものに分離できる。ここで M は全質量、 μ は換算質量である。従って、波動関数は重心位置のみに依存する部分と相対位置のみに依存する部分の積で表すことができる。

3.3 スピン依存性を考慮しない場合の微分散乱断面積

以下では、重心系で考えて相対座標のみに着目して同種粒子の散乱を考える。入射粒子は z 軸の負の方向から入射するとする。教科書の式 (12.38) と式 (12.43) で導出したように、このときの波動関数の漸近形と微分散乱断面積は

$$u(r, \theta, \phi) \rightarrow A \left[e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta) \right] \quad (r \rightarrow \infty) \quad (32)$$

$$\frac{d\sigma(\theta, \phi)}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$$

であった⁷。従って、粒子の入れ替えに関して対称な波動関数の漸近形と微分散乱断面積は

$$u(r, \theta, \phi) \rightarrow A \left[e^{ikz} + e^{-ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} \{ f(\theta) + f(\pi - \theta) \} \right] \quad (r \rightarrow \infty) \quad (33)$$

$$\frac{d\sigma(\theta, \phi)}{d\Omega} = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2$$

$$= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 + 2 \operatorname{Re} f^*(\theta) f(\pi - \theta)$$

となる。微分散乱断面積の式の右辺の第1項は入射粒子が θ 方向で検出されるとき微分散乱断面積に対応し、第2項は標的粒子が θ 方向で検出されるとき微分散乱断面積に対応し、その和は粒子が識別できるとき微分散乱断面積に対応する。第3項は粒子の同等性を表している。 $\theta = \pi/2$ のときは

$$f(\theta) = f(\pi - \theta) = f\left(\frac{\pi}{2}\right) \quad (34)$$

となり、粒子が識別できないときの微分散乱断面積は

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\theta=\frac{\pi}{2}} = 4 \left| f\left(\frac{\pi}{2}\right) \right|^2 \quad (35)$$

⁷波動関数は z 軸周りの回転に関して対称なので ϕ 依存性はない。

となり，粒子が識別できるときの微分散乱断面積は

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\theta=\frac{\pi}{2}} = 2\left|f\left(\frac{\pi}{2}\right)\right|^2 \quad (36)$$

同様に，粒子の入れ替えに関して反対称な波動関数の漸近形と微分散乱断面積は

$$\begin{aligned} u(r, \theta, \phi) &\rightarrow A \left[e^{ikz} - e^{-ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} \{ f(\theta) - f(\pi - \theta) \} \right] \quad (r \rightarrow \infty) \\ \frac{d\sigma(\theta, \phi)}{d\Omega} &= |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 - 2 \operatorname{Re} f^*(\theta) f(\pi - \theta) \end{aligned} \quad (37)$$

となる． $\theta = \pi/2$ のときは

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\theta=\frac{\pi}{2}} = 0 \quad (38)$$

となる⁸．

3.4 陽子-陽子散乱

ここでは，2つの陽子の散乱をスピンを考慮して考える．相対運動の波動関数 $\Phi(\mathbf{r}, s_1^z, s_2^z)$ を相対座標 \mathbf{r} のみに依存する部分とスピン s_1^z, s_2^z に依存する部分に分離して

$$\Phi(\mathbf{r}, s_1^z, s_2^z) = u(\mathbf{r})\chi(s_1^z, s_2^z) \quad (39)$$

と表す．陽子は2つの粒子の入れ替えに関して反対称なので，スピンに関する部分の対称性・反対称性に応じて，波動関数全体は反対称となるように，相対座標に依存する部分の対称性・反対称性が決まる．

陽子のスピンは $\frac{1}{2}$ で，陽子-陽子系の合成スピンは0または1である．教科書15.1節で述べたように，合成スピンの0の状態をスピン一重項 (singlet) といい，スピン一重項の波動関数はスピンの入れ替えに対して反対称なので，波動関数がスピンと位置の入れ替えに対して反対称になるように，スピン一重項の空間部分は位置の入れ替えに対して対称となる．

$$\chi_s(s_1^z, s_2^z) = -\chi_s(s_2^z, s_1^z), \quad u_s(\mathbf{r}) = u(-\mathbf{r}) \quad (40)$$

従って，反対称化する前の散乱振幅を $f_s(\theta)$ として，散乱振幅は

$$f_s^{(S)}(\theta) = f_s(\theta) + f_s(\pi - \theta) \quad (41)$$

となる．

合成スピンの1の状態はスピン三重項 (triplet) といい，スピン三重項の波動関数はスピンの入れ替えに対して対称なので，波動関数がスピンと位置の入れ替えに対して反対称になるように，スピン三重項の空間部分は位置の入れ替えに対して反対称となる．

$$\chi_t(s_1^z, s_2^z) = \chi_t(s_2^z, s_1^z), \quad u_t(\mathbf{r}) = -u(-\mathbf{r}) \quad (42)$$

従って，反対称化する前の散乱振幅を $f_t(\theta)$ として，散乱振幅は

$$f_t^{(A)}(\theta) = f_t(\theta) - f_t(\pi - \theta) \quad (43)$$

となる．

⁸ここでは Fermion のスピンを考慮していないが，現実の Fermion 同士の衝突ではスピンを考慮する必要がある．次節では，その例として陽子-陽子散乱を扱う．

| 表 2: 波動関数の対称性 | | | |
|---------------|--------|-------|--------|
| 合成スピン | スピン依存性 | 空間依存性 | 波動関数全体 |
| 0 | 反対称 | 対称 | 反対称 |
| 1 | 対称 | 反対称 | 反対称 |

入射粒子と散乱粒子のスピン測定が困難な実験では、入射粒子のスピンについての平均をとり、散乱粒子のスピンについてを和をとる。入射粒子が偏極していない場合には、スピン 1 重項には 1/4 の統計的重みがあり、スピン 3 重項には 3/4 の統計的重みがあるので、散乱断面積は

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma(\theta, \phi)}{d\Omega} &= \frac{1}{4}|f_s^{(S)}(\theta)|^2 + \frac{3}{4}|f_t^{(A)}(\theta)|^2 \\ &= \frac{1}{4}|f_s(\theta) + f_s(\pi - \theta)|^2 + \frac{3}{4}|f_t(\theta) + f_t(\pi - \theta)|^2\end{aligned}\quad (44)$$

となる。

陽子を低いエネルギーで入射した場合は、核力の効果は無視できて、Coulomb 力による散乱だけを考えればよい。また、低エネルギーではスピンの変化は無視できて、散乱振幅はスピンによらないと近似できるので、教科書の式 (13.110) より

$$f_s(\theta) = f_t(\theta) = f_c(\theta), \quad f_c(\theta) = \frac{\gamma}{2k \sin^2 \frac{\theta}{2}} \exp(-i\gamma \ln \sin^2 \frac{\theta}{2} - i\pi + 2i\eta_0) \quad (45)$$

となる。ここで、

$$\gamma = \frac{mZZ'\alpha c}{\hbar k}, \quad mv = \hbar k, \quad \eta_0 = \arg \Gamma(1 + i\gamma) \quad (46)$$

である。また教科書の式 (13.112) より

$$\frac{d\sigma_c(\theta)}{d\Omega} := |f_c(\theta)|^2 = \left(\frac{\gamma}{2k \sin^2 \frac{\theta}{2}}\right)^2 = \left(\frac{ZZ'\alpha \hbar c}{2mv^2}\right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (47)$$

である。これらを式 (44) に代入すると

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma(\theta, \phi)}{d\Omega} &= \frac{1}{4}|f_c(\theta) + f_c(\pi - \theta)|^2 + \frac{3}{4}|f_c(\theta) - f_c(\pi - \theta)|^2 \\ &= |f_c(\theta)|^2 + |f_c(\pi - \theta)|^2 - \operatorname{Re}[f_c(\theta)f_c^*(\pi - \theta)] \\ &= \frac{d\sigma_c(\theta)}{d\Omega} + \frac{d\sigma_c(\pi - \theta)}{d\Omega} - \frac{\gamma^2}{4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \sin^2 \frac{\pi - \theta}{2}} \operatorname{Re}\left[\exp(-i\gamma \ln \sin^2 \frac{\theta}{2} + i\gamma \ln \sin^2 \frac{\pi - \theta}{2})\right] \\ &= \left(\frac{ZZ'\alpha \hbar c}{2mv^2}\right)^2 \left[\frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} + \frac{1}{\cos^4 \frac{\theta}{2}} - \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2} \cos^4 \frac{\theta}{2}} \cos(\gamma \ln \tan^2 \frac{\theta}{2})\right]\end{aligned}\quad (48)$$

となる。これを Mott の公式という。このように同種粒子の散乱では微分散乱断面積に対数的に振動する位相が現れる。

4 参考文献

[1] 猪木慶治・川合光「量子力学Ⅱ」(講談社)