


課題演習A5

理論ゼミ

担当範囲: 坂井典佑、「量子力学II」、12.3~13.2

中本那央



12.3 確率の流れと光学定理

散乱問題: 入射波と散乱波が存在

→波動関数は入射波と散乱波の重ね合わせ

確率の流れ: 入射波と散乱波の干渉項

確率の保存から、無限遠での境界条件の式の正しさを確かめられる

確率の保存則: 確率の流れ \mathbf{j} 、確率密度 ρ

$$\rho(\mathbf{r}, t) = (\psi(\mathbf{r}, t))^* \psi(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{j} := \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi) \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \therefore \frac{d}{dt} \int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r &= \int \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right) d^3r \\ &= -\frac{\hbar}{2mi} \int \left(\psi^* \nabla^2 \psi - (\nabla^2 \psi^*) \psi \right) d^3r \quad (\nabla^2(\mathbf{r}) \in \mathbb{R}) \\ &= -\frac{\hbar}{2mi} \int \nabla \cdot \left(\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi \right) d^3r \\ &= -\frac{\hbar}{2mi} \int_S \left(\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi \right) \cdot \mathbf{n} dS \quad (3) \end{aligned}$$

波動関数 $\psi(\mathbf{r}, t)$ はエネルギーの固有状態

→確率密度は時間によらない

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-i\omega t}, \quad \omega = \frac{E}{\hbar} \quad (4)$$

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + (E - V) \psi = 0 \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + (E - V) \psi^* = 0 \end{cases} \quad (5)$$

$$\rightarrow \psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^* = 0$$

$$\rightarrow \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = 0 \Leftrightarrow \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (6)$$

→ 全確率 $\int \rho d^3r$ が保存

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho d^3r = \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} d^3r = - \int_V \nabla \cdot \mathbf{j} d^3r = - \int \mathbf{j} \cdot \mathbf{n} dS = 0 \quad (7)$$

波動関数の漸近形についての確率の流れ

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}^{\text{in}} + \mathbf{j}^{\text{int}} + \mathbf{j}^{\text{out}} \quad (8)$$

入射波 干渉 散乱波

球座標での ∇

$$\nabla = \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \mathbf{e}_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (9)$$

を球面波に対して用いる

$$\text{球面波: } u(r, \theta, \phi) = A \left(e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{r} f(\theta, \phi) \right) \quad (10)$$

$z = -\infty$ の平面波 $r \rightarrow \infty$ の球面波

$$\begin{aligned} \nabla u(r, \theta, \phi) = & A \left(i\mathbf{k} \cos \theta e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \mathbf{e}_r + \left(i\mathbf{k} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{r} - \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{r^2} \right) f(\theta, \phi) \mathbf{e}_r \right. \\ & \left. + (i\mathbf{k} r (-\sin \theta)) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \frac{1}{r} \mathbf{e}_\theta + \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{r^2} \frac{\partial f}{\partial \theta} \mathbf{e}_\theta + \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \phi} \mathbf{e}_\phi \right) \end{aligned} \quad (11)$$

$$\mathbf{e}_z = \cos \theta \mathbf{e}_r - \sin \theta \mathbf{e}_\theta \text{ を用いる.}$$

$$\nabla u(r, \theta, \varphi) = i\hbar A (\mathbf{e}_z e^{i\hbar z} + \mathbf{e}_r \frac{e^{i\hbar r}}{r} f(\theta, \varphi) + O(\frac{1}{r^2})) \quad (12)$$

$$u_{out} = A \frac{e^{i\hbar r}}{r} f(\theta, \varphi) \text{ s.t. } j_{int}^{out} \approx O(\frac{1}{r^2}) \quad (13)$$

$$u_{in} = A e^{i\hbar z} \text{ s.t. } j_{int}^{in} = \frac{\hbar \hbar}{m} |A|^2 \mathbf{e}_z \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \varphi^* \nabla \varphi - \varphi \nabla \varphi^* &= A^* (e^{-i\hbar z} + \frac{e^{-i\hbar r}}{r} f^*(\theta, \varphi)) \cdot i\hbar A (\mathbf{e}_z e^{i\hbar z} + \mathbf{e}_r \frac{e^{i\hbar r}}{r} f(\theta, \varphi)) \\ &\quad - A (e^{i\hbar z} + \frac{e^{i\hbar r}}{r} f(\theta, \varphi)) (-i\hbar A^*) (\mathbf{e}_z e^{-i\hbar z} + \mathbf{e}_r \frac{e^{-i\hbar r}}{r} f^*(\theta, \varphi)) \\ &= |A|^2 i\hbar \left(2\mathbf{e}_z + \frac{\mathbf{e}_z + \mathbf{e}_r}{r} (f(\theta, \varphi) e^{i\hbar(r-z)} + f^*(\theta, \varphi) e^{-i\hbar(r-z)}) \right) \end{aligned} \quad (15)$$

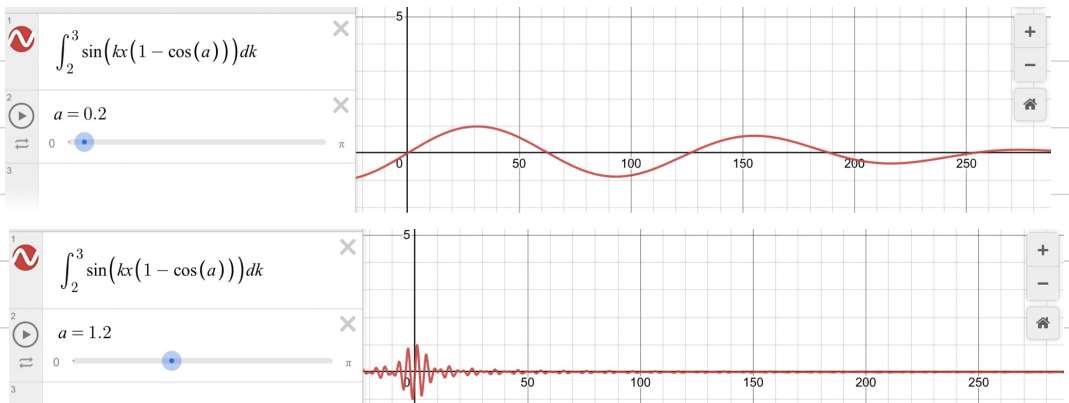
j_{int}^{in} と対応
 j_{int}^{out} と対応

$$\rightarrow j_{int}^{out} \approx |A|^2 \frac{\hbar \hbar}{2m} \frac{1}{r} (\mathbf{e}_z + \mathbf{e}_r) (f(\theta, \varphi) e^{i\hbar(r-z)} + f^*(\theta, \varphi) e^{-i\hbar(r-z)}) \quad (16)$$

干渉項の指数: $\hbar(r-z) = \hbar r(1 - \cos\theta)$ (17)

$r \gg |a| \approx 3z$, $\theta = 0$ 以外は小さく干渉力。

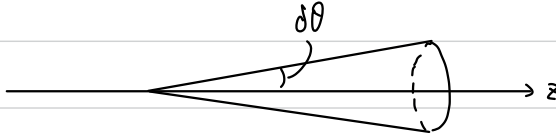
→ 波束を作るために異なる波数を重ね合わせる(kで積分する)と、 $\theta \neq 0$ の方向は波が打ち消し合う



干渉項は前方方向に鋭いピーク, $f(\theta, \varphi) = f(\theta = 0)$ と置き換えられる

$$\theta \approx 0 \text{ かつ } \mathbf{e}_r \approx \mathbf{e}_z$$

$$\rightarrow j_r^{int} \approx |A|^2 \frac{\hbar k}{m r} (f(\theta) e^{i k r (1 - \cos \theta)} + f^*(\theta) e^{-i k r (1 - \cos \theta)}) \quad (18)$$



前方方向の確率を見るために、小さな角度 $\delta\theta$ まで積分

$$2\pi r^2 \int_0^{\delta\theta} d\theta \sin\theta j_r^{int} \approx |A|^2 \frac{2\pi r \hbar k}{m} \left(f(\theta) \frac{1 - e^{i k r (1 - \cos \delta\theta)}}{-i k r} + f^*(\theta) \frac{1 - e^{-i k r (1 - \cos \delta\theta)}}{i k r} \right) \quad (19)$$

先程と同様に、 $e^{\pm i k r (1 - \cos \delta\theta)}$ に関する項は無視できる

$$\rightarrow 2\pi r^2 \int_0^{\delta\theta} d\theta \sin\theta j_r^{int} \approx -|A|^2 \frac{4\pi \hbar}{m} \text{Im} f(\theta) \quad (20)$$

よって、確率の保存は、

$$\begin{aligned} 0 &= \int_V \mathbf{j} \cdot \mathbf{n} dS \\ &= \int_{\theta > \pi/2} \mathbf{j}^in \cdot \mathbf{n} dS + \left(\int_{\theta < \pi/2} \mathbf{j}^in \cdot \mathbf{n} dS + \int_V \mathbf{j}^{int} \cdot \mathbf{n} dS \right) + \int_V \mathbf{j}^{out} \cdot \mathbf{n} dS \\ &= -|A|^2 \frac{\hbar k}{m} \Delta S + |A|^2 \left(\frac{\hbar k}{m} \Delta S - \frac{4\pi \hbar}{m} \text{Im} f(\theta) \right) + |A|^2 \frac{\hbar k}{m} \int_V d\Omega |f(\theta, \varphi)|^2 \quad (21) \end{aligned}$$

$\Delta S \rightarrow -\infty$ かつ $\Delta S \rightarrow \infty$ 干渉項の分だけ減少 球面波, $r \rightarrow \infty$ 出ている

$$\therefore \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(\theta) = \int_V d\Omega |f(\theta, \varphi)|^2 =: \sigma \quad (22)$$

光学定理: 弾性散乱振幅の虚数部分が全断面積を与える

物理的意味: 干渉により減少するフラックスと、散乱により球面波として出ていくフラックスがバランスを取っている

12.4 散乱行列とユニタリティ

散乱問題: 十分過去と十分未来で相互作用のポテンシャルを無視

→自由粒子の波動関数 ϕ_α が正しい解 $(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi_\alpha = E \phi_\alpha)$

十分過去: 十分大きな T_1 に対して、 $t < -T_1$.

十分未来: 十分大きな T_2 に対して、 $t > T_2$

十分過去に自由粒子の波動関数から出発すると考える

ポテンシャルも含めて考えた正しい解を $\psi_\alpha(\mathbf{r}, t)$

$$\psi_\alpha(\mathbf{r}, t) = \phi_\alpha(\mathbf{r}, t) \quad t < -T_1 \quad (22)$$

エルミート演算子 \hat{O} の固有状態は完全系をなす

$$\hat{O} |n\rangle = O_n |n\rangle$$

$$|4\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

十分未来で、再び自由粒子の波動関数の重ね合わせで書ける

散乱での観測: 正確な波動関数 ψ_α を自由粒子の波動関数 ϕ_β で分解して考える

$$S_{\beta\alpha} := (\phi_\beta(t'), \psi_\alpha(t')) \quad t' > T_2 \quad \text{散乱行列、S行列} \quad (23)$$

ハミルトニアンがエルミートするとき、内積は不変

$$\begin{aligned} \therefore \frac{d}{dt} (\psi_\beta, \psi_\alpha) &= \left(\frac{\partial \psi_\beta}{\partial t}, \psi_\alpha \right) + \left(\psi_\beta, \frac{\partial \psi_\alpha}{\partial t} \right) \\ &= \left(\frac{i}{\hbar} \hat{H} \psi_\beta, \psi_\alpha \right) + \left(\psi_\beta, \frac{i}{\hbar} \hat{H} \psi_\alpha \right) \end{aligned}$$

$$= -\frac{1}{i\hbar} (\psi_\beta, \hat{H} \psi_\alpha) + \frac{1}{i\hbar} (\psi_\beta, \hat{H} \psi_\alpha) = 0 \quad (24)$$

これを用いると、内積は任意の時刻 t に対して、

$$(\psi_\beta, \psi_\alpha) = (\psi_\beta, \psi_\alpha)_{t' < -T_1} = (\phi_\beta, \phi_\alpha)_{t' < -T_1} = \delta_{\beta\alpha} \quad (25)$$

自由粒子の波動関数は完全系

$$\rightarrow \psi_\alpha(x, t) = \sum_\beta \phi_\beta(x, t) a_{\beta\alpha} \quad t > T_1 \quad (26)$$

自由粒子の波動関数 ϕ_i との内積を取ると、

$$a_{i\alpha} = (\phi_i, \psi_\alpha) = S_{i\alpha} \quad t' > T_2 \quad (27)$$

ϕ_α の完全性と ψ_α の正規直交性を用いると、

$$\sum_i S_{i\beta}^* S_{i\alpha} = \sum_i (\psi_\beta, \phi_i) (\phi_i, \psi_\alpha) = (\psi_\beta, \psi_\alpha) = \delta_{\beta\alpha} \quad (\Leftrightarrow) \quad S^\dagger S = 1. \quad (28)$$

$\therefore S$ はユニタリ行列; 散乱行列のユニタリティ

シュレディンガー方程式の解 ψ_α も完全系をなす

$$\rightarrow \phi_\alpha(x, t) = \sum_\beta \psi_\beta(x, t) S_{\beta\alpha}^{-1} \quad t > T_2 \quad (29)$$

これを用いると、 $S S^\dagger = 1$ も言える

散乱振幅 $f(\theta, \varphi)$ は素通しの波だけを取り除いた残りの部分に比例する

→この部分を **T** 行列

$$S_{\beta\alpha} = \delta_{\beta\alpha} - iT_{\beta\alpha} \quad (30)$$

クロネッカーのデルタは自由粒子に対応

これを $S^\dagger S = 1$ に代入すると,

$$i(T - T^\dagger) = T^\dagger T \quad (31)$$

散乱振幅が確率を保存するために満たさないといけない最も一般的な条件がユニタリティ

前方散乱振幅: 入射波と散乱粒子が同じ場合 ($\alpha = \beta$)

(参考)

$\psi = A(e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \frac{1}{r} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} f(\theta, \varphi))$, $\phi = A e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ とすると、自由粒子からのズレは、

$$T_{\alpha\alpha} = i |A|^2 \int d^3k \frac{1}{r} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}(1-\cos\theta)} f(\theta, \varphi) \quad \left| \quad i(T_{\alpha\alpha} - T_{\alpha\alpha}^\dagger) = -\frac{4\pi}{k} |A|^2 \text{Im} f(\theta) \int dr \right.$$

ここで、

$$\sim = 2\pi \int dr r \int_0^{2\pi} d\theta \sin\theta e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}(1-\cos\theta)} f(\theta) \quad \left| \quad \text{右辺?} \right.$$

$$\sim = \frac{1}{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} (e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}(1-\cos\theta)} - 1)$$

$$\simeq -\frac{1}{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} f(\theta)$$

一般論の方が見やすいかも

よって、

$$T_{\alpha\alpha} \simeq -|A|^2 \frac{2\pi}{k} f(\theta) \int dr$$

13 球対称ポテンシャルでの散乱

13.1 部分波

定常状態に対する球座標でのシュレディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) u + V(r)u = Eu \quad (1)$$

u を変数分離して解く

$$u = R(r) Y(\theta, \phi) \text{ と } \lambda \text{ と } \gamma \text{ と}$$

$$\begin{cases} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (rR) + \left(\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{\lambda}{r^2} \right) R = 0 \\ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} + \lambda Y = 0 \quad \dots (*) \end{cases} \quad (2)$$

$\lambda = \ell(\ell+1)$ のときには有界な解を得る。 $r=0$ に関して。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) R_\ell = E R_\ell \quad (3)$$

θ 、 ϕ についての議論

以下のLegendreの微分方程式がもととなる。この解をLegendre多項式と呼ぶ。

$$\frac{d}{dz} \left((1-z^2) \frac{dP}{dz} \right) + \ell(\ell+1)P = 0 \quad (4)$$

(*)式は、 θ と ϕ に変数分離できて、 θ に関して、

$$\frac{d}{dz} \left((1-z^2) \frac{dP^m}{dz} \right) + \left(\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{1-z^2} \right) P^m = 0 \quad (5)$$

となる。この解は、Legendre多項式を用いて

$$P_\ell^m = (1-z^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|} P_\ell}{dz^{|m|}} \quad (6)$$

と表せる。

具体的な表式は、以下ようになる。

$$P_\ell(z) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{dz^\ell} (z^2 - 1)^\ell \quad (7)$$

$$P_\ell^m(z) = (-z^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{dz^{|m|}} P_\ell(z) \quad \text{Legendreの陪関数} \quad (8)$$

$$\rightarrow Y_\ell^m(\theta, \varphi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}} P_\ell^m(\cos\theta) e^{im\varphi} \quad \text{球面調和関数} \quad (9)$$

l: 軌道角運動量の大きさ, m: 軌道角運動量のz成分

通常はz軸周りの対称性がある $\rightarrow m=0$ の場合のみを考える

$$Y_\ell^{m=0} = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_\ell(\cos\theta) \quad (10)$$

軌道方向の波動関数の規格化を少し変える

$$u(r, \theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^\ell \hat{R}_\ell(r) P_\ell(\cos\theta) \quad (11)$$

部分波: 角運動量ごとに分解して得られる波動関数の成分

原点での境界条件: 波動関数が原点付近で有界という条件から決まる

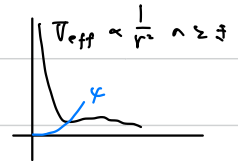
(参考: 猪木川合, p137~138)

$$\hat{R}_\ell \propto r^\ell \quad (r \approx 0) \quad (12)$$

原点付近のポテンシャルの振る舞いのもとに、波動関数の振る舞いを考察できる

散乱問題の特徴: 無限遠点での境界条件の課しかたにある

\rightarrow 自由粒子の球面波を詳しく検討



自由粒子のシュレディンガー方程式

$$p = \hbar k, \quad \hbar = \frac{\sqrt{2mE}}{k} \quad \text{といふ}$$

$$\frac{d^2 \hat{R}_l}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\hat{R}_l}{dr} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) \hat{R}_l = 0 \quad \dots (1) \quad \text{球面波を表す} \quad (13)$$

13.2 位相のずれと部分波断面積

ハミルトニアンが連続固有値のとき、進行波解が存在

→無限遠での境界条件: 入射波方向以外からは波が入ってこない

右図のように、考慮するポテンシャルごとに領域を分けて考える

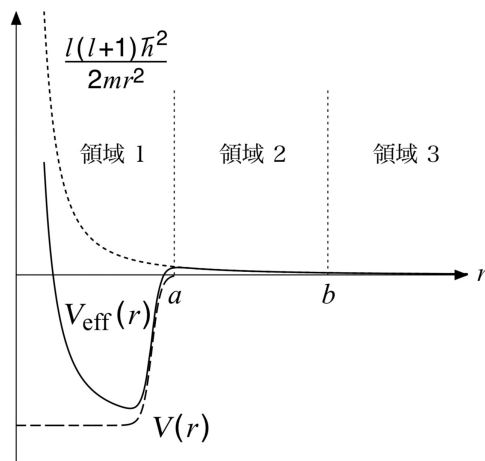
領域2: (†)の方程式

→一次独立な解は球ベッセル関数

$$j_l(x) = (-x)^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx}\right)^l \left(\frac{\sin x}{x}\right) \quad (14)$$

$$n_l(x) = -(-x)^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx}\right)^l \left(\frac{\cos x}{x}\right)$$

$$\hat{R}_l(r) = A_l (\cos \delta_l j_l(\hbar r) - \sin \delta_l n_l(\hbar r)) \quad (15)$$



引用: http://www.th.phys.titech.ac.jp/~muto/lectures/QMII09/QMII09_chap23.pdf

動径方向の方程式は実数だから、 $r=0$ で実数で出発したら実数解になるはず

$$\rightarrow \delta_l \in \mathbb{R}$$

A_l は規格化因子だから一般に複素数

球ベッセル関数の漸近形

$$j_l(r) \rightarrow \frac{1}{r} \sin\left(r - \frac{l}{2}\pi\right) \quad (16)$$

$$n_l(r) \rightarrow -\frac{1}{r} \cos\left(r - \frac{l}{2}\pi\right)$$

これを用いると、領域3での波動関数の漸近形が表せる

$$\bar{R}_l(r) \rightarrow \frac{A_l}{r} \sin\left(kr - \frac{l}{2}\pi + \delta_l\right) \quad (r \rightarrow \infty) \quad (17)$$

位相のずれ: 自由粒子の確率振幅の場合との振動の位相差

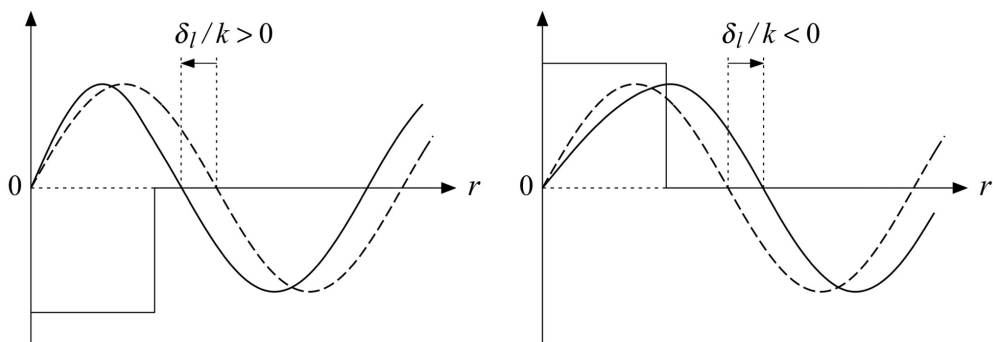


図 23.2: 引力ポテンシャル (左) と斥力ポテンシャル (右) による位相のずれ

引用: http://www.th.phys.titech.ac.jp/~muto/lectures/QM1109/QM1109_chap23.pdf

位相のずれ δ_l と散乱振幅との関係を見る

→入射平面波をルジャンドル関数で展開

平面波を球面波で展開する公式

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{z}} = e^{i\mathbf{k}r\cos\theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^{\ell} j_{\ell}(kr) P_{\ell}(\cos\theta)$$

$$\sim \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^{\ell} \frac{1}{2kr} \left(\underset{\text{外向き}}{e^{i(kr - \frac{\ell+1}{2}\pi)}} + \underset{\text{内向き}}{e^{-i(kr - \frac{\ell+1}{2}\pi)}} \right) P_{\ell}(\cos\theta) \quad (18)$$

∴) 平面波はシュレディンガー方程式の解なので、

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{z}} = e^{i\mathbf{k}r\cos\theta} = \sum_{\ell, m} R_{\ell}(kr) Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) \quad \dots \alpha$$

と表せる。平面波は ϕ によらないので、

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{z}} = \sum_{\ell} R_{\ell}(kr) P_{\ell}(\cos\theta) \quad \dots \beta$$

ここで、

$$R_{\ell}(r) = a_{\ell} j_{\ell}(r) + b_{\ell} n_{\ell}(r) \quad \dots \delta$$

となるが、平面波は原点で有界だから、 $b_{\ell} = 0$

$$\therefore \sum_{\ell} \frac{1}{\ell!} (i\mathbf{k}r\cos\theta)^{\ell} = \sum_{\ell} a_{\ell} j_{\ell}(kr) P_{\ell}(\cos\theta) \quad \dots \delta$$

$|\mathbf{k}r\cos\theta| \approx 0$ のときを考えて、 $(kr)^{\ell} (\cos\theta)^{\ell}$ の係数を比べる。

$$j_{\ell}(kr) = \frac{2^{\ell} \ell!}{(2\ell+1)!} (kr)^{\ell} + (\text{高次}) \quad , \quad P_{\ell}(\cos\theta) = \frac{(2\ell)!}{2^{\ell} (\ell!)^2} (\cos\theta)^{\ell} + \dots \quad \dots \epsilon$$

だから、

$$\frac{i^{\ell}}{\ell!} = a_{\ell} \frac{2^{\ell} \ell!}{(2\ell+1)!} \cdot \frac{(2\ell)!}{2^{\ell} (\ell!)^2} \quad \dots \zeta$$

$$\therefore a_{\ell} = (2\ell+1) i^{\ell} \quad \dots \eta$$

参考: http://www.phys.shimane-u.ac.jp/mochizuki_lab/QMIII2006_4.pdf

ちょうどこの位相で重ね合わされたときのみ平面波

⇔位相がずれると、散乱波が出てくる

波動関数 u を球面波で表し、領域 3 の波動関数の漸近形と等置すると、

$$A \left(\sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^{\ell} \frac{1}{kr} \sin(kr - \frac{\ell}{2}\pi) P_{\ell}(\cos\theta) + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right) \\ = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^{\ell} A_{\ell} \frac{1}{kr} \sin(kr - \frac{\ell}{2}\pi + \delta_{\ell}) P_{\ell}(\cos\theta) \quad (19)$$

内向き球面波は入射平面波だけから現れるから、内向き球面波の係数は等しくなる

$$A = A_{\ell} e^{-i\delta_{\ell}} \quad (20)$$

これより、無限遠で境界条件を満たす波動関数は、

$$u(r, \theta) = A \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^{\ell} e^{i\delta_{\ell}} (\cos\delta_{\ell} j_{\ell}(kr) - \sin\delta_{\ell} n_{\ell}(kr)) P_{\ell}(\cos\theta) \quad (21)$$

境界条件: 入射波以外は、外向きに出ていく球面波だけ

このとき、外向き球面波の係数は、

$$A \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^{\ell} \frac{1}{2kr} e^{-i\frac{\ell+1}{2}\pi} P_{\ell}(\cos\theta) + A \frac{1}{r} f(\theta) \\ = A \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^{\ell} e^{i\delta_{\ell}} e^{-i\frac{\ell+1}{2}\pi + i\delta_{\ell}} \frac{1}{2kr} P_{\ell}(\cos\theta) \quad (22)$$

$$e^{-i\frac{\ell+1}{2}\pi} = (-i)^{\ell+1} \quad \text{を用いる} \quad \text{とすると、}$$

$$f(\theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \frac{1}{2k} ((-i)^{\ell+1} e^{i\delta_{\ell}} \cdot e^{i\delta_{\ell}} - (-i)^{\ell+1}) P_{\ell}(\cos\theta) \\ = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_{\ell}} - 1) P_{\ell}(\cos\theta) \quad (23)$$

$$f_\ell = \frac{1}{R} e^{i\delta_\ell} \sin \delta_\ell = \frac{1}{R} \frac{1}{\omega + \delta_\ell - i} \quad \text{と} \quad (17)$$

$$f(\theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) f_\ell P_\ell(\cos\theta) \quad (24)$$

各部分波の位相が入射波からずれていることが散乱波を与える

○位相のずれ δ_ℓ から全ての情報が得られる

微分散乱断面積を位相のずれで表す公式

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \left| \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) f_\ell P_\ell(\cos\theta) \right|^2 \quad (25)$$

$$\sigma = 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin\theta \frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sigma_\ell \quad (26)$$

$$\sigma_\ell = 4\pi(2\ell+1) |f_\ell|^2 = \frac{4\pi}{R^2} (2\ell+1) \sin^2 \delta_\ell \quad (27)$$

$$\text{c.f.) } \int_{-1}^1 P_m(x) P_n(x) dx = \frac{2}{2n+1} \delta_{mn} \quad (28)$$

$x = \cos\theta$ とすると、

$$\int_0^\pi d\theta P_m(\cos\theta) P_n(\cos\theta) \sin\theta = \frac{2}{2n+1} \delta_{mn} \quad (29)$$

これを用いると、

$$\begin{aligned} \int_0^\pi d\theta \sin\theta \frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} &= \int_0^\pi d\theta \sin\theta |f(\theta)|^2 \\ &= \int_0^\pi d\theta \sin\theta \sum_{m=0}^{\infty} (2m+1) f_m^* P_m(\cos\theta) \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) f_n P_n(\cos\theta) \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} (2m+1) f_m^* \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) f_n \frac{2}{2n+1} \delta_{mn} \\ &= \sum_{\ell=0}^{\infty} 2(2\ell+1) |f_\ell|^2 \quad (30) \end{aligned}$$

$P_e(e^{i\theta} = 1) > 1$ を用いると、前方散乱断面積は、

$$f(\theta=0) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \frac{1}{k} e^{i\delta_{\ell}} \sin \delta_{\ell} \quad (31)$$

これより、

$$\begin{aligned} f(\theta=0) - f^*(\theta=0) &= 2i \operatorname{Im} f(\theta=0) \\ &= \frac{2}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \sin^2 \delta_{\ell} \quad (32) \end{aligned}$$

となるので、

$$\sigma = \frac{2\pi}{k^2} (f(\theta=0) - f^*(\theta=0)) = \frac{4\pi}{k^2} \operatorname{Im} f(\theta=0) \quad (33)$$

散乱全断面積は前方散乱振幅の虚数部分で与えられる

参考文献

- (1) 坂井典佑、『量子力学 II』、培風館