

課題演習 A5 理論ゼミ 資料

東堂 翼

13.3 位相のずれと散乱長

— 今までの話の整理 —

散乱が軸対称であるとき、波動関数は角運動量について部分波展開できる。

$$u(r, \theta) = \sum_l u_l(r, \theta) \quad (1)$$

$$u_l(r, \theta) = (2l + 1) i^l \tilde{R}_l(r) P_l(\cos \theta) \quad (2)$$

ここに、 $P_l(\cos \theta)$ は Legendre 多項式である。

ポテンシャルの有効距離が有限である場合、十分遠方ではポテンシャルの影響は位相のずれ δ_l として現れる。位相のずれと散乱振幅の間には、以下の関係が成り立っている。

$$f(\theta) = \sum_l (2l + 1) \frac{e^{i\delta_l} \sin \delta_l}{k} P_l(\cos \theta) \quad (3)$$

また、全散乱断面積 σ_{tot} は位相のずれ δ_l を用いて以下のように表せる。

$$\sigma_{\text{tot}} = \int |f(\theta)|^2 d\Omega \quad (4)$$

$$= \sum_l \frac{4\pi(2l + 1)}{k^2} \sin^2 \delta_l \quad (5)$$

■波動関数の解と接続条件 ポテンシャル $V(r)$ が $r > a$ ($a : \text{Const}$) の範囲で遠心力ポテンシャルに対し十分無視できるような状況を考えよう。このとき、 $r > a$ ではポテンシャルの寄与が無視できるため、波動関数は自由粒子の Sch.eq に従う。その解は球 Bessel 関数 j_l, n_l を用いて

$$\tilde{R}_l^+(r) = A e^{i\delta_l} \{j_l(kr) \cos \delta_l - n_l(kr) \sin \delta_l\} \quad (r > a) \quad (6)$$

と表すことができる ([1](13.17) 式参照)。ここで、ポテンシャルがない ($a = 0$) 場合は波動関数の原点での正則性より $\delta_l = 0$ になることに注意しよう。これより位相のずれ δ_l が散乱の影響として現れていることがわかる。

$r < a$ の波動関数は、ポテンシャルを含む Sch.eq を解くことで決まる。ここでは、その解を形式的に $\tilde{R}_l^-(r)$ とおくことにしよう。

これらをまとめると、以下ようになる。

$$\tilde{R}_l(r) = \begin{cases} \tilde{R}_l^-(r) & (r < a) \\ \tilde{R}_l^+(r) & (r > a) \end{cases} \quad (7)$$

これらの解について、 $r = a$ における接続条件を考えよう。接続条件は、 $r = a$ で波動関数とその微分が連続という条件であるが、これらをまとめて以下のようにする。

$$\left[\frac{1}{\tilde{R}_l^-(r)} \frac{d}{dr} \tilde{R}_l^-(r) \right]_{r=a-0} = \left[\frac{1}{\tilde{R}_l^+(r)} \frac{d}{dr} \tilde{R}_l^+(r) \right]_{r=a+0} \quad (8)$$

この左辺の値を γ_l とおき、右辺の微分を実行すると、

$$\gamma_l = \frac{k(j_l'(ka) \cos \delta_l - n_l'(ka) \sin \delta_l)}{j_l(ka) \cos \delta_l - n_l(ka) \sin \delta_l} \quad (9)$$

$$= \frac{k(j_l'(ka) - n_l'(ka) \tan \delta_l)}{j_l(ka) - n_l(ka) \tan \delta_l} \quad (10)$$

となり、これを δ_l について解くと、以下ようになる。

$$\tan \delta_l = \frac{kj_l'(ka) - \gamma_l j_l(ka)}{kn_l'(ka) - \gamma_l n_l(ka)} \quad (11)$$

これより、位相のずれを接続条件から求めることができる。

■**低エネルギー極限と散乱長** 先ほど求めた式 (11) について、低エネルギー極限 $ka \rightarrow 0$ を考えてみよう。球 Bessel 関数は、原点付近で以下のようにふるまう。

$$j_l(\rho) \simeq \frac{2^l l!}{(2l+1)!} \rho^l \quad (12)$$

$$n_l(\rho) \simeq -\frac{(2l)!}{2^l l!} \frac{1}{\rho^{l+1}} \quad (13)$$

これを代入すると、式 (11) は以下のように近似できる。

$$\tan \delta_l \simeq \frac{2^{2l} (l!)^2}{(2l+1)!(2l)!} \frac{kl(ka)^{l-1} - \gamma_l (ka)^l}{k \frac{l+1}{(ka)^{l+2}} + \gamma_l \frac{1}{(ka)^{l+1}}} \quad (14)$$

$$= \frac{2^{2l} (l!)^2}{(2l+1)!(2l)!} \frac{l - \gamma_l a}{l+1 + \gamma_l a} (ka)^{2l+1} \quad (15)$$

これより、低エネルギー極限 $ka \rightarrow 0$ では、 $\delta_l \simeq \tan \delta_l \propto (ka)^{2l+1} \rightarrow 0$ となることがわかる。

ここで、散乱振幅と位相のずれの関係式 (3) を見ると、 $f(\theta) \propto \frac{1}{k}$ であるため、低エネルギー極限において散乱振幅には $l = 0$ の部分波 (S 波) のみが寄与することがわかる。そこで、**散乱長** α を

以下のように定義する。^{*1}

$$f(\theta) \rightarrow \frac{e^{i\delta_0} \sin \delta_0}{k} \simeq \frac{\delta_0}{k} = -\alpha \quad (k \rightarrow 0) \quad (16)$$

散乱長 α は低エネルギー散乱を特徴付ける量であり、長さの次元を持つ。その物理的な意味は以降で考察する。

13.4 剛体球による散乱

具体例として、剛体球による散乱を考えよう。半径 a の剛体球のポテンシャルは、

$$V(r) = \begin{cases} \infty & (r < a) \\ 0 & (r > a) \end{cases} \quad (17)$$

と表される。境界条件 $\tilde{R}_l(a) = 0$ より、対数微分 γ_l は無限大に発散する。したがって、式 (11) は、

$$\tan \delta_l = \frac{j_l(ka)}{n_l(ka)} \quad (18)$$

となり、これより

$$\sin^2 \delta_l = \frac{j_l^2(ka)}{j_l^2(ka) + n_l^2(ka)} \quad (19)$$

となる。これを式 (5) に代入することで、全散乱面積は、以下のように計算できる。

$$\sigma_{\text{tot}} = \sum_l \frac{4\pi(2l+1)}{k^2} \sin^2 \delta_l \quad (20)$$

$$= \sum_l \frac{4\pi(2l+1)}{k^2} \frac{j_l^2(ka)}{j_l^2(ka) + n_l^2(ka)} \quad (21)$$

■**低エネルギー極限** 低エネルギー極限 $ka \ll 1$ を考えよう。先ほど議論したように、低エネルギー極限では $l = 0$ の S 波のみが寄与する。式 (12),(13) で与えられた Bessel 関数の極限で $l = 0$ として式 (18) に代入すると、

$$\tan \delta_0 = -ka \quad (22)$$

したがって、

$$\delta_0 = -ka \quad (ka \rightarrow 0) \quad (23)$$

^{*1} より高次の項を取り入れるとき、 $k \cot \delta \rightarrow -\frac{1}{\alpha} + \frac{1}{2}r_{\text{eff}}k^2 + \dots$ と展開される。ここに、 α は散乱長であり、 r_{eff} は有効距離と呼ばれる量である。一般に低エネルギー散乱は散乱長と有効距離の 2 つのパラメータでよく記述される。(なお、式 (15) より δ は k の偶関数になることがわかる。 k についての補正の最低次が 2 次になっているのはこのためである。)

これより、散乱長は式 (16) より、

$$\alpha = -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\delta_0}{k} = a \quad (24)$$

と計算される。これより、散乱長の物理的な意味が「ポテンシャル $V(r)$ 下での散乱における散乱長は、低エネルギー極限で同じ位相のずれを与える剛体球の半径である」とわかる。

このとき、全散乱断面積は式 (4),(16) より、

$$\sigma_{\text{tot}} = \int |f(\theta)|^2 d\Omega \quad (25)$$

$$= 4\pi a^2 \quad (ka \ll 1) \quad (26)$$

となり、これは剛体球の表面積に一致する。このようになる理由は、S波が球対称であり球の表面全体で散乱されるためであると解釈できる。

■高エネルギー極限 今度は高エネルギー極限 $ka \gg 1$ を考えよう。高エネルギー領域では、 $l \leq l_{\text{max}} \simeq ka$ までの部分波が寄与すると仮定しよう。^{*2}

球 Bessel 関数の無限遠での振る舞い

$$j_l(\rho) = \frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right) \quad (27)$$

$$n_l(\rho) = -\frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right) \quad (28)$$

を式 (21) に代入すると、

$$\sin^2 \delta_l = \sin^2\left(ka - \frac{l\pi}{2}\right) \quad (29)$$

となり、 l が整数であることに注意すれば、

$$\sin^2 \delta_l = \begin{cases} \sin^2(ka) & (l : \text{even}) \\ \cos^2(ka) & (l : \text{odd}) \end{cases} \quad (30)$$

となる。 $\sin^2 \delta_l + \cos^2 \delta_l = 1$ であることを考えれば、任意の l について

$$\sin^2 \delta_l + \sin^2 \delta_{l+1} = 1 \quad (31)$$

が成立することがわかる。この関係は後の計算で用いる。

^{*2} この仮定の妥当性は衝突パラメータの観点から議論することができる。例えば、[5],[6]などを参照されたい。

このことから、全散乱断面積は式 (5) より以下のように表すことができる。

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l_{\text{max}}} (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (32)$$

$$= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l_{\text{max}}} \left\{ l \sin^2 \delta_l + (l+1) \underbrace{\sin^2 \delta_l}_{=1-\sin^2 \delta_{l+1}} \right\} \quad (33)$$

$$= \frac{4\pi}{k^2} \left\{ \sum_{l=0}^{l_{\text{max}}} (l+1) - \sum_{l=0}^{l_{\text{max}}} ((l+1) \sin^2 \delta_{l+1} - l \sin^2 \delta_l) \right\} \quad (34)$$

ここで右辺第 2 項は差分の形になっていることに着目すると、この値は上端と下端を代入した値の差となり l_{max} のオーダーであることがわかる。これに対し、第 1 項は l_{max}^2 のオーダーとなるため、 $l_{\text{max}} \simeq ka \gg 1$ の極限では第 1 項の寄与だけ考えればよく、

$$\sigma_{\text{tot}} \simeq \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l_{\text{max}}} (l+1) \quad (35)$$

$$\simeq \frac{2\pi}{k^2} l_{\text{max}}^2 \quad (36)$$

$$= 2\pi a^2 \quad (ka \gg 1) \quad (37)$$

と計算できる。^{*3}これは古典的な散乱断面積 $\sigma_{\text{tot}}^{\text{C}} = \pi a^2$ の 2 倍になっている。これは先ほど計算した $\sigma_{\text{tot}}^{\text{Q}}$ (量子的な結果であることを強調するために Q の添字をつけた) が、球の前面からの断面積 $\sigma_{\text{tot}}^{\text{C}}$ と、回折により球の裏側へ回り込んだ波による散乱 $\sigma_{\text{tot}}^{\text{S}}$ の和で与えられていると解釈される。すなわち、

$$\underbrace{\sigma_{\text{tot}}^{\text{Q}}}_{\text{量子力学的な散乱断面積}} = \underbrace{\sigma_{\text{tot}}^{\text{C}}}_{\text{古典的な散乱断面積}} + \underbrace{\sigma_{\text{tot}}^{\text{S}}}_{\text{回折した波の与える散乱断面積}} \quad (38)$$

このように、回折した波が散乱を与える現象を**影散乱**という。

13.5 3次元井戸型ポテンシャルによる散乱

3次元井戸型ポテンシャル

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & (r < a) \\ 0 & (r > a) \end{cases} \quad (39)$$

^{*3} この計算の方法についてはいくつかの考え方がある。ここで扱ったやり方の他にも、和を書き下してうまく $(\sin^2(ka) + \cos^2(ka))$ の組を作っていく方法などもある ([1],[5] などはこの方法で考えている)。[6] では、 $\sin^2 \delta_l \simeq \frac{1}{2}$ と近似して計算しているが、式 (30) から分かるようにこの和に寄与している三角関数の位相は実質的に 1 つだけであるため、 $\sin^2 \delta_l$ を $\frac{1}{2}$ に“ならして”しまうこの近似を実行してよいかは自明でないと思う。

による散乱を考えよう。 $r < a$ での解は、自由粒子の解(6)においてエネルギーのシフト分だけ波数を補正したものになる。そこで、

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}} \quad (40)$$

$$= \sqrt{k^2 + \frac{2mV_0}{\hbar^2}} \quad (41)$$

とすると、 $r < a$ での解は、

$$\tilde{R}_l(r) = B_l j_l(\kappa r) \quad (r < a) \quad (42)$$

と書ける。ここで、 n_l の係数は $r = 0$ での波動関数の正則性からゼロになっている。このとき、 $r = a$ での対数微分は、

$$\gamma_l = \frac{\kappa j_l'(\kappa a)}{j_l(\kappa a)} \quad (43)$$

となる。

■**低エネルギー極限** 低エネルギー極限を考えよう。今まで見てきたように、低エネルギー極限では $l = 0$ のS波のみが寄与すると考えられる。 $l = 0$ では、球 Bessel 関数は三角関数を用いて以下のように表すことができる。

$$j_0(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho} \quad (44)$$

$$n_0(\rho) = -\frac{\cos \rho}{\rho} \quad (45)$$

これを式(11)に代入して、

$$\tan \delta_0 = \frac{k \frac{ka \cos(ka) - \sin(ka)}{(ka)^2} - \gamma_0 \frac{\sin(ka)}{ka}}{k \frac{ka \sin(ka) + \cos(ka)}{(ka)^2} + \gamma_0 \frac{\cos(ka)}{(ka)}} \quad (46)$$

$$= \frac{ka \cos(ka) - (\gamma_0 a + 1) \sin(ka)}{ka \sin(ka) + (\gamma_0 a + 1) \cos(ka)} \quad (47)$$

$$\simeq \frac{\gamma_0 a}{\gamma_0 a + 1} ka \quad (ka \rightarrow 0) \quad (48)$$

となる。最後の変形は $\sin(ka) \simeq ka, \cos(ka) \simeq 1$ として、 (ka) の2次以上の項を無視した。

また、対数微分は式(43)より、

$$\gamma_0 = \frac{\kappa \frac{\kappa a \cos(\kappa a) - \sin(\kappa a)}{(\kappa a)^2}}{\frac{\sin(\kappa a)}{(\kappa a)}} \quad (49)$$

$$= \frac{1}{a} \left(\frac{\kappa a}{\tan(\kappa a)} - 1 \right) \quad (50)$$

つまり、

$$\gamma_0 a = \left(\frac{\kappa a}{\tan(\kappa a)} - 1 \right) \quad (51)$$

と計算できるので、これを式 (48) に代入すると、以下のようになる。

$$\tan \delta_0 = - \frac{\frac{\kappa a}{\tan \kappa a} - 1}{\frac{\kappa a}{\tan(\kappa a)}} ka \quad (52)$$

$$= \left(\frac{\tan(\kappa a)}{\kappa a} - 1 \right) ka \quad (53)$$

ここで、 $ka \rightarrow 0$ で、 $\kappa a \rightarrow \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} a = \kappa_0 a$ となるので、低エネルギー極限では、

$$\tan \delta_0 \simeq \delta_0 = - \left(1 - \frac{\tan(\kappa_0 a)}{\kappa_0 a} \right) ka \quad (ka \rightarrow 0) \quad (54)$$

となり、散乱長 α は、

$$\alpha = \left(1 - \frac{\tan(\kappa_0 a)}{\kappa_0 a} \right) a \quad (55)$$

と与えられ、微分散乱断面積は式 (16) より以下のようになる。

$$\frac{d\sigma(\Omega)}{d\Omega} = \underbrace{|f(\theta)|^2}_{=\alpha^2} \quad (56)$$

$$= \left(1 - \frac{\tan(\kappa_0 a)}{\kappa_0 a} \right)^2 a^2 \quad (57)$$

この結果より、 $\tan(\kappa_0 a) = \kappa_0 a$ となるとき、散乱断面積は 0 になることがわかる。この現象を **Ramsauer-Townsend 効果** と呼ぶ。このとき、式 (53) より位相のずれは π の整数倍になるが、これは波動関数の符号に影響するだけであるため位相のずれの影響が実質的に見えなくなってしまうのである。

また、 $\kappa_0 a = (n + \frac{1}{2})\pi$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) となるとき、散乱長や微分散乱断面積は発散してしまい非物理的である。このことから、発散点の周りでは低エネルギー極限の扱いは慎重に行う必要があることがわかる。微分散乱断面積のふるまいを確認するため、 $f(x) = \left(1 - \frac{\tan(\pi x)}{\pi x} \right)^2$ のグラフを以下に示す。散乱断面積が 0 になる点と発散する点に近い位置にあることは興味深い事実である。

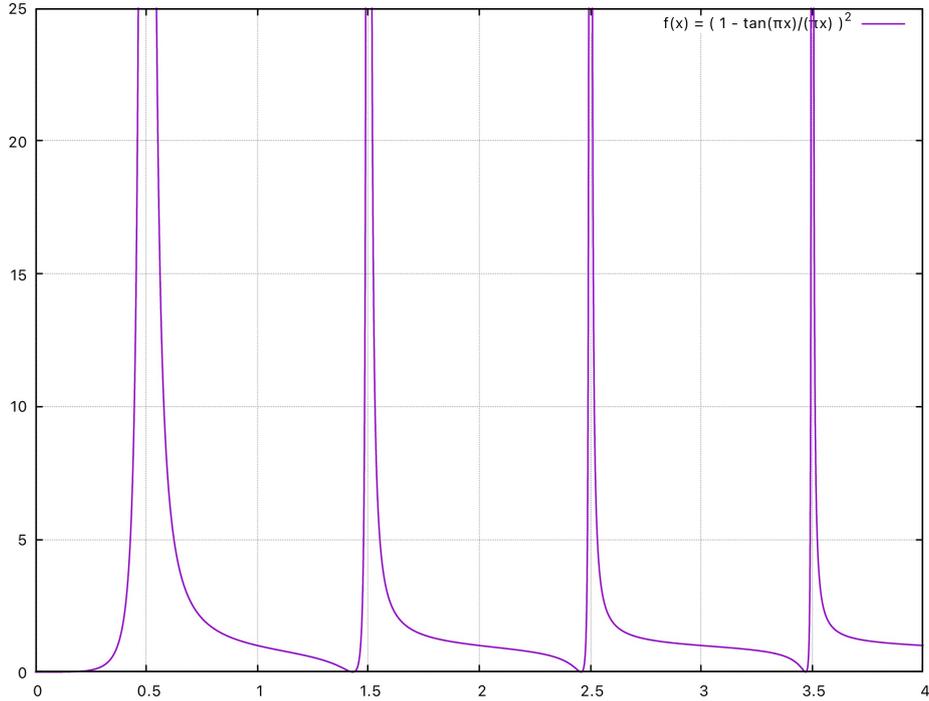


図1 微分散乱断面積のふるまい

■発散点の物理的解釈とユニタリー極限 散乱長が発散する点の物理的な意味を考えよう。ポテンシャルの深さ V_0 は束縛状態のエネルギー E より十分大きいとする。式 (50) で計算した対数微分

$$\gamma_0 = \frac{1}{a} \left(\frac{\kappa a}{\tan(\kappa a)} - 1 \right) \quad (58)$$

が有限であることに注意すると、 $V_0 \rightarrow \infty (\kappa a \rightarrow \infty)$ としたとき、 $\tan(\kappa a) \rightarrow \infty$ とならなければならない。すなわち、

$$\kappa a = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi \quad (59)$$

となる。ここで、

$$\kappa a = \sqrt{\frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}} a \quad (60)$$

$$= \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} a \left(1 + \frac{E}{V_0} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (61)$$

$$= \kappa_0 a \left(1 + \frac{E}{V_0} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (62)$$

$$\simeq \kappa_0 a \left(1 + \frac{E}{2V_0} \right) \quad (63)$$

であるから、結局

$$\frac{E}{2V_0} = \frac{\kappa a}{\kappa_0 a} - 1 \quad (64)$$

$$= \frac{(n + \frac{1}{2})\pi}{\kappa_0 a} - 1 \quad (65)$$

となる。これより、発散点 $\kappa_0 a = (n + \frac{1}{2})\pi$ は、束縛状態のエネルギー E が 0 になる点であると解釈できる。このように、束縛状態のエネルギーが 0 になる点で散乱長が発散する現象はポテンシャルの詳細によらず普遍的に見られるものであり、その発散点を**ユニタリ極限**という。

参考文献

- [1] 坂井 典佑 『基礎物理学課程 量子力学 II』 (培風館,2000)
- [2] 猪木 慶治, 河合 光 『量子力学 I』 (講談社サイエンティフィック,1994)
- [3] 猪木 慶治, 河合 光 『量子力学 II』 (講談社サイエンティフィック,1994)
- [4] 萩野 浩一 『物理学アドバンスドシリーズ 量子力学』 (日本評論社,2022)
- [5] 並木 美喜雄, 大場一郎 『散乱の量子力学』 (岩波書店,1997)
- [6] J.J. サクライ 『現代の量子力学 下 第3版』 (吉岡書店,2023)