

第I部

散乱理論

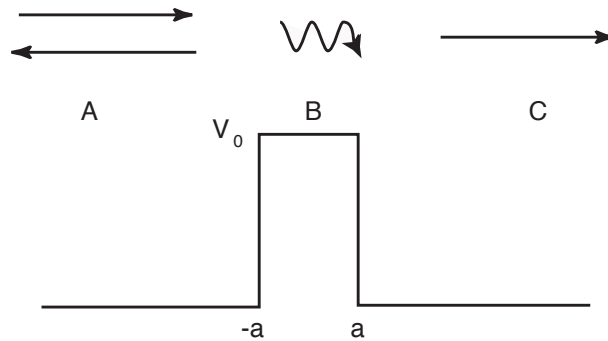
1 一次元の散乱理論

このセクションでは次の図のようなポテンシャルが存在する系に左から入射する粒子がある場合の1次元系における散乱現象を例として取り上げ散乱理論の基本を議論する。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = H \Psi(x, t)$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x \in [-a, a] \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$



ここでは波動関数の時間依存性が分離できることを仮定して(定常状態)

$$\Psi(x, t) = e^{-i\omega t} \Psi(x)$$

$$H \Psi(x) = E \Psi(x), \quad E = \hbar\omega$$

のようにおく。

1.1 転送行列の方法

1.1.1 転送行列と散乱状態、束縛状態

まず次のように考えてみよう。系を A: $(-\infty, -a)$, B: $[-a, a]$, C: (a, ∞) と3つの領域に分ける。各領域 ($r = A, B, C$) での解はポテンシャルが定数だからある波

数 k_r を用いて

$$\Psi_r(x) = \xi^+ e^{ik_r x} + \xi^- e^{-ik_r x}, \quad \frac{\hbar^2 k_r^2}{2m} = E - V_r$$

と書ける。ここで一般に $x = \xi$ での波動関数の接続条件は前後の波動関数を Ψ_1 、 Ψ_2 として $\Psi_1(\xi) = \Psi_2(\xi)$ および $\Psi_1'(\xi) = \Psi_2'(\xi)$ であり、それを書き下すと

$$\begin{aligned} \xi_1^+ e^{ik_1 \xi} + \xi_1^- e^{-ik_1 \xi} &= \xi_2^+ e^{ik_2 \xi} + \xi_2^- e^{-ik_2 \xi} \\ k_1(\xi_1^+ e^{ik_1 \xi} - \xi_1^- e^{-ik_1 \xi}) &= k_2(\xi_2^+ e^{ik_2 \xi} - \xi_2^- e^{-ik_2 \xi}) \end{aligned}$$

となる。行列表示では、

$$\begin{aligned} M_\xi(k_1) \begin{pmatrix} \xi_1^+ \\ \xi_1^- \end{pmatrix} &= M_\xi(k_2) \begin{pmatrix} \xi_2^+ \\ \xi_2^- \end{pmatrix} \\ M_\xi(k) &= \begin{pmatrix} e^{ik\xi} & e^{-ik\xi} \\ k e^{ik\xi} & -k e^{-ik\xi} \end{pmatrix}, \quad M_\xi^{-1}(k) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} e^{-ik\xi} & \frac{1}{2k} e^{-ik\xi} \\ \frac{1}{2} e^{ik\xi} & -\frac{1}{2k} e^{ik\xi} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

と書け、書き直すと

$$\begin{pmatrix} \xi_1^+ \\ \xi_1^- \end{pmatrix} = T_\xi(k_1, k_2) \begin{pmatrix} \xi_2^+ \\ \xi_2^- \end{pmatrix} \quad T_\xi(k_1, k_2) = M_\xi^{-1}(k_1) M_\xi(k_2)$$

となる。特に、今の問題の場合これを繰り返し使って

$$\begin{pmatrix} \xi_A^+ \\ \xi_A^- \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} \xi_C^+ \\ \xi_C^- \end{pmatrix}, \quad T = T_{-a}(k_{out}, k_{in}) T_a(k_{in}, k_{out})$$

ここで

$$\frac{\hbar^2 k_{out}^2}{2m} = E, \quad \frac{\hbar^2 k_{in}^2}{2m} + V_0 = E$$

である。より複雑な散乱体における散乱も同様に扱える。

ここで境界条件として以下の2種類を考えよう。

- 境界条件 I: $\Psi(x) \sim e^{ikx}$, $x \rightarrow \infty$

これは時間に依存する波動関数の $x \rightarrow +\infty$ での漸近形が $e^{i(kx - \omega t)}$ となることから分かるように $x \rightarrow +\infty$ では、 x 方向の正の向きに進行する波動 (散乱波のみ) であることを要求することに対応する。この状態は散乱状態と呼ばれ、具体的には $\xi_C^- = 0$, ($\xi_C^+ = 1$) を条件として要求する。エネルギーが E は正であれば ($E > 0$) 必ずこの散乱状態は存在し、反射係数 \mathcal{R} 透過係数 \mathcal{T} は

$$\begin{pmatrix} \xi_A^+ \\ \xi_A^- \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} \\ T_{21} \end{pmatrix}$$

より定まる ξ_A^+ , ξ_A^- を用いて、

$$\mathcal{R} = \frac{\xi_A^-}{\xi_A^+} = \frac{T_{21}}{T_{11}}$$

$$\mathcal{T} = \frac{1}{\xi_A^+} = \frac{1}{T_{11}}$$

と定まる。(反射率は $|\mathcal{R}|^2$ 、透過率は $|\mathcal{T}|^2$)

なお透過係数, 反射係数の間には、

$$|\mathcal{T}|^2 + |\mathcal{R}|^2 = 1$$

の関係がある。これは以下に述べるように微分方程式のロンスキー行列式を考察することで一般的に示せる。

ポテンシャル V が実である場合 $\Psi(x)$ が解であればその複素共役 $\Psi^*(x)$ も解である。またシュレディンガー方程式は1次の微分を含まないのでそのロンスキー行列式 $W(x) = W(\Psi(x), \Psi^*(x))$ は x に依存しない。¹ また漸近的に

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + \mathcal{R}e^{-ikx} & x \approx -\infty \\ \mathcal{T}e^{ikx} & x \approx \infty \end{cases}$$

ととれるのでロンスキー行列式を評価して $W(-\infty) = W(\infty)$ より $|\mathcal{T}|^2 + |\mathcal{R}|^2 = 1$ が従う。

別な言い方をすれば x 方向のカレント J_x を次のように定義し

$$J_x = \frac{\hbar}{2mi} W(\psi^*, \psi)$$

$$= \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{d\psi}{dx} - \frac{d\psi^*}{dx} \psi \right)$$

¹ $f(x)$ についての微分方程式

$$f'' + p(x)f' + q(x)f = 0$$

の2つの解 f_1, f_2 についてロンスキー行列式を

$$W(x) = W(f_1, f_2) = \det \begin{pmatrix} f_1 & f_2 \\ f_1' & f_2' \end{pmatrix}$$

とすると

$$W' = \det \begin{pmatrix} f_1 & f_2 \\ f_1' & f_2' \end{pmatrix}' = \det \begin{pmatrix} f_1 & f_2 \\ -pf_1' - qf_1 & -pf_2' - qf_2 \end{pmatrix} = -pW$$

より

$$W(x) = W(y)e^{-\int_y^x dt p(t)}$$

その保存則として以下のように表現することもできる。

$$\frac{dJ_x}{dx} = 0.$$

2

- 境界条件 II: $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)| dx < +\infty$ この条件を満たすためには、まず波数が純虚数であること、つまりエネルギーが E は負であること ($E < 0$) が必要であり、

$$k_{out} = i\kappa, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}$$

更にこのように k_{out} を定義したとき波動関数が指数関数的に発散しないためには、 $\xi_A^+ = 0$ ならびに、 $\xi_C^- = 0$ が必要である。具体的には、

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} \xi_C^+ \\ 0 \end{pmatrix}$$

と書いてこの第1式

$$T_{11} = 0$$

が波数 k に関する制限を与える。この状態を散乱状態に対して 束縛状態 と呼ぶ。

ここで散乱状態を議論した際の透過係数 T 、反射係数 R の定義を振り返ると 束縛状態のエネルギー並びに波数は 透過係数、反射係数の複素 k 平面上の上半面での極 として定まることがわかる。

²まず $x \approx -\infty$ においては

$$\begin{aligned} W(-\infty) &= \det \begin{pmatrix} e^{ikx} + \mathcal{R}e^{-ikx} & e^{-ikx} + \mathcal{R}^*e^{ikx} \\ ik e^{ikx} - ik \mathcal{R}e^{-ikx} & -ike^{-ikx} + ik \mathcal{R}^*e^{ikx} \end{pmatrix} \\ &= \det \begin{pmatrix} e^{ikx} + \mathcal{R}e^{-ikx} & e^{-ikx} + \mathcal{R}^*e^{ikx} \\ 2ike^{ikx} & 2ik \mathcal{R}^*e^{ikx} \end{pmatrix} = \det \begin{pmatrix} e^{ikx} + \mathcal{R}e^{-ikx} & (1 - |\mathcal{R}|^2)e^{-ikx} \\ 2ike^{ikx} & 0 \end{pmatrix} \\ &= 2ik(|\mathcal{R}|^2 - 1) \end{aligned}$$

また $x \approx \infty$ においては

$$\begin{aligned} W(\infty) &= \det \begin{pmatrix} T e^{ikx} & T^* e^{-ikx} \\ ik T e^{ikx} & -ik T^* e^{-ikx} \end{pmatrix} = \det \begin{pmatrix} T e^{ikx} & T^* e^{-ikx} \\ 0 & -2ik T^* e^{-ikx} \end{pmatrix} \\ &= -2ik |T|^2 \end{aligned}$$

転送行列による1次元箱型ポテンシャルでの散乱問題

簡単な箱型ポテンシャル中での散乱問題の具体的な計算をここで示そう。まず一つの境界での転送行列は³

$$\mathbf{T}_\xi(k_1, k_2) = \frac{1}{2k_1} \begin{pmatrix} (k_1 + k_2)e^{-i(k_1 - k_2)\xi} & (k_1 - k_2)e^{-i(k_1 + k_2)\xi} \\ (k_1 - k_2)e^{i(k_1 + k_2)\xi} & (k_1 + k_2)e^{i(k_1 - k_2)\xi} \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{T} &= \mathbf{T}_{-a}(k_o, k_i)\mathbf{T}_a(k_i, k_o) \\ &= \frac{1}{4k_i k_o} \begin{pmatrix} (k_o + k_i)e^{i(k_o - k_i)a} & (k_o - k_i)e^{i(k_o + k_i)a} \\ (k_o - k_i)e^{-i(k_o + k_i)a} & (k_o + k_i)e^{-i(k_o - k_i)a} \end{pmatrix} \\ &\quad \times \begin{pmatrix} (k_i + k_o)e^{-i(k_i - k_o)a} & (k_i - k_o)e^{-i(k_i + k_o)a} \\ (k_i - k_o)e^{i(k_i + k_o)a} & (k_i + k_o)e^{i(k_i - k_o)a} \end{pmatrix} \\ T_{11} &= \frac{e^{i2k_o a}}{4k_i k_o} \left[(k_i + k_o)^2 e^{-2ik_i a} - (k_i - k_o)^2 e^{2ik_i a} \right] \\ T_{21} &= -\frac{1}{4k_i k_o} (k_i^2 - k_o^2) (e^{-2ik_i a} - e^{2ik_i a}) \\ T_{12} &= \frac{1}{4k_i k_o} (k_i^2 - k_o^2) (e^{-2ik_i a} - e^{2ik_i a}) \\ T_{22} &= \frac{e^{-i2k_o a}}{4k_i k_o} \left[(k_i + k_o)^2 e^{2ik_i a} - (k_i - k_o)^2 e^{-2ik_i a} \right] \end{aligned}$$

よって例えば

- 完全透過

$$T_{21} = 0$$

すなわち

$$\sin 2k_i a = \sin \frac{2a\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} = 0$$

の時反射無し $\mathcal{R} = 0$ よって $|T| = 1$ と完全透過となる。

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_\xi(k_1, k_2) &= \mathbf{M}_\xi^{-1}(k_1)\mathbf{M}_\xi(k_2) \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{-ik_1\xi} & \frac{1}{k_1}e^{-ik_1\xi} \\ e^{ik_1\xi} & -\frac{1}{k_1}e^{ik_1\xi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_2\xi} & e^{-ik_2\xi} \\ k_2e^{ik_2\xi} & -k_2e^{-ik_2\xi} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2k_1} \begin{pmatrix} k_1e^{-ik_1\xi} & e^{-ik_1\xi} \\ k_1e^{ik_1\xi} & -e^{ik_1\xi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_2\xi} & e^{-ik_2\xi} \\ k_2e^{ik_2\xi} & -k_2e^{-ik_2\xi} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2k_1} \begin{pmatrix} (k_1 + k_2)e^{-i(k_1 - k_2)\xi} & (k_1 - k_2)e^{-i(k_1 + k_2)\xi} \\ (k_1 - k_2)e^{i(k_1 + k_2)\xi} & (k_1 + k_2)e^{i(k_1 - k_2)\xi} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

- 束縛状態

$E \leq 0$ の時、すなわち $k_o = i\kappa$ (κ : 実として ($\frac{\hbar^2 k_o^2}{2m} = E$))

$$T_{11} = 0$$

の解を探すと

$$\left(\frac{k_i + i\kappa}{k_i - i\kappa} \right)^2 = e^{i4k_i a}$$

のとき束縛状態が存在する。

- トンネル現象

$$E < V_0$$

のとき古典的には粒子は障壁を越えられないが

$$\begin{aligned} k_i &= i\kappa_i \\ \kappa_i &= \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \end{aligned}$$

として透過率を計算すれば一般に $|T| > 0$ これは量子効果で障壁を越えたことを意味し、これをトンネル効果という。

ポテンシャルに比べて入射粒子のエネルギーが十分小さいとき ($|k_o| \ll |k_i| = \kappa$)⁴

$$|T|^2 \approx \frac{16k_o^2}{\kappa^2} \left(\frac{1}{1 - e^{-4\kappa a}} \right)^2 e^{-4\kappa a}$$

とポテンシャルの壁のあつさに関して著しく早く透過率が減少する。

- デルタ関数型ポテンシャル

$$V(x) = g\delta(x)$$

4

$$\begin{aligned} |T_{11}| &= \frac{\kappa}{4k_o} \left[\left(1 + \frac{k_o}{i\kappa} \right)^2 e^{2\kappa a} - \left(1 - \frac{k_o}{i\kappa} \right)^2 e^{-2\kappa a} \right] \\ &= \frac{\kappa}{4k_o} (e^{2\kappa a} - e^{-2\kappa a}) \\ |T|^2 &= \frac{1}{|T_{11}|^2} = \frac{16k_o^2}{\kappa^2} \frac{1}{(1 - e^{-4\kappa a})^2} e^{-4\kappa a} \end{aligned}$$

の場合⁵

$$V_0 2a \rightarrow g, \quad (|V_0| \rightarrow \infty, \quad a \rightarrow 0)$$

の極限を考えればよく、⁶ ($\frac{2m}{\hbar^2} g \equiv \tilde{g}$)

$$\begin{aligned} T_{11} &= 1 + i \frac{\tilde{g}}{2k_o}, & T_{21} &= -i \frac{\tilde{g}}{2k_o}, \\ T_{22} &= 1 - i \frac{\tilde{g}}{2k_o}, & T_{12} &= i \frac{\tilde{g}}{2k_o} \end{aligned}$$

よって

$$|T|^2 = \frac{1}{1 + \left(\frac{\tilde{g}}{2k_o}\right)^2}, \quad |\mathcal{R}|^2 = \frac{\left(\frac{\tilde{g}}{2k_o}\right)^2}{1 + \left(\frac{\tilde{g}}{2k_o}\right)^2}$$

1.1.2 転送行列と散乱行列



図のような配置で自由空間からある領域に入射、反射する波動関数があるとしよう。このとき左側の波動関数を $\psi_i e^{ikx} + \psi_r e^{-ikx}$ 右側の波動関数を $\psi_o e^{ikx} + \psi_{i'} e^{-ikx}$ とすると確率の保存から⁷

$$|\psi_i|^2 - |\psi_r|^2 = |\psi_o|^2 - |\psi_{i'}|^2$$

⁵

$$\begin{aligned} V_0 2a &\rightarrow g, \quad (|V_0| \rightarrow \infty, \quad a \rightarrow 0) \\ -k_i^2 2a &\rightarrow \frac{2m}{\hbar^2} g \equiv \tilde{g} \quad \left(-\frac{\hbar k_i^2}{2m} \rightarrow V_0\right) \\ |k_i| &\rightarrow \infty, \quad a \rightarrow 0, \quad (|k_i| a \rightarrow 0) \end{aligned}$$

⁶

$$\begin{aligned} T_{11} &= \frac{1}{4k_i k_o} \left((k_i + k_o)^2 - (k_i - k_o)^2 e^{i4k_i a} \right) \\ &\approx \frac{1}{4k_i k_o} \left(4k_i k_o - (k_i - 0)^2 i 4k_i a \right) \\ &= 1 - i \frac{k_i^2 a}{k_o} = 1 + i \frac{\tilde{g}}{2k_o} \\ T_{21} &= -\frac{1}{4k_i k_o} (k_i^2 - 0)(-i 4k_i a) \\ &= i \frac{k_i^2 a}{k_o} = -i \frac{\tilde{g}}{2k_o} \end{aligned}$$

⁷ ロンスキー行列式を計算する。

が導ける。ここで1次元の散乱行列 S を次のように定義して

$$\begin{pmatrix} \psi_r \\ \psi_o \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} \psi_i \\ \psi_{i'} \end{pmatrix}$$

すれば S はユニタリ行列となる。⁸

$$SS^\dagger = S^\dagger S = I$$

更に転送行列 T を次のように定義して

$$\begin{pmatrix} \psi_o \\ \psi_{i'} \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} \psi_i \\ \psi_r \end{pmatrix}$$

$$T^\dagger J T = J$$

$$J = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

が成立する。⁹

より詳しくは、散乱行列 S を

$$S = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix}$$

としたとき (マルチチャンネルの場合をふくめて)

$$T = \begin{pmatrix} t^{\dagger-1} & r' t'^{-1} \\ -t'^{-1} r & t^{-1} \end{pmatrix}$$

⁸保存則は

$$|\psi_r|^2 + |\psi_o|^2 = (\psi_r^*, \psi_o^*) \begin{pmatrix} \psi_r \\ \psi_o \end{pmatrix} = (\psi_i^*, \psi_{i'}^*) S^\dagger S \begin{pmatrix} \psi_i \\ \psi_{i'} \end{pmatrix} = (\psi_i^*, \psi_{i'}^*) \begin{pmatrix} \psi_i \\ \psi_{i'} \end{pmatrix}$$

これが任意の $\psi_i, \psi_{i'}$ で成立するから $S^\dagger S = I$.

⁹保存則は

$$|\psi_o|^2 - |\psi_{i'}|^2 = (\psi_o^*, \psi_{i'}^*) J \begin{pmatrix} \psi_o \\ \psi_{i'} \end{pmatrix} = (\psi_i^*, \psi_r^*) T^\dagger J T \begin{pmatrix} \psi_i \\ \psi_r \end{pmatrix} = (\psi_i^*, \psi_r^*) J \begin{pmatrix} \psi_i \\ \psi_r \end{pmatrix}$$

より

$$T^\dagger J T = J$$

と書ける。¹⁰ ここで

$$\begin{aligned} T^{-1} &= J T^\dagger J \\ (T T^\dagger)^{-1} &= (T^{-1})^\dagger T^{-1} = J T T^\dagger J \end{aligned}$$

より $T T^\dagger$ と $(T T^\dagger)^{-1}$ との固有値非負でその組は等しいからそれらの固有値はすべて

$$e^{\pm 2x_n}, x_n \geq 0$$

¹⁰ユニタリティーは

$$S^\dagger S = \begin{pmatrix} r^\dagger & t^\dagger \\ t'^\dagger & r'^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r^\dagger r + t^\dagger t & r^\dagger t' + t^\dagger r' \\ t'^\dagger r + r'^\dagger t & t'^\dagger t' + r'^\dagger r' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (*1)$$

$$S S^\dagger = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r^\dagger & t^\dagger \\ t'^\dagger & r'^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r r^\dagger + t' t'^\dagger & r t^\dagger + t' r'^\dagger \\ t r^\dagger + r' t'^\dagger & t t^\dagger + r' r'^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (*2)$$

この関係式のもとで S 行列の定義より

$$\begin{aligned} \psi_r &= r \psi_i + t' \psi_{i'} \\ \psi_o &= t \psi_i + r' \psi_{i'} \end{aligned}$$

ここで $\psi_{i'} = 0$ を境界条件としてもし要求すれば t が透過率、 r が反射率を表すことは見て取れる。これを $\psi_o, \psi_{i'}$ について解いて転送行列を求めよう。まず第一式より

$$\psi_{i'} = -t'^{-1} r \psi_i + t'^{-1} \psi_r$$

第2式へいれて

$$\psi_o = t \psi_i - r' t'^{-1} r \psi_i + r' t'^{-1} \psi_r = (t - r' t'^{-1} r) \psi_i + r' t'^{-1} \psi_r$$

ここでユニタリティーより

$$\begin{aligned} 1 &= t t^\dagger + r' r'^\dagger = t t^\dagger + r' (t'^{-1} t') r'^\dagger = t t^\dagger + r' t'^{-1} (-r t^\dagger) \\ &= (t - r' t'^{-1} r) t^\dagger \end{aligned}$$

これから

$$\psi_o = t^{\dagger^{-1}} \psi_i + r' t'^{-1} \psi_r$$

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \psi_o \\ \psi_{i'} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} t^{\dagger^{-1}} & r' t'^{-1} \\ -t'^{-1} r & t'^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_i \\ \psi_r \end{pmatrix} \\ T &= \begin{pmatrix} t^{\dagger^{-1}} & r' t'^{-1} \\ -t'^{-1} r & t'^{-1} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

とかけ、また少し計算すれば^{*11}

$$\left(\mathbf{TT}^\dagger + (\mathbf{TT}^\dagger)^{-1} + 2\mathbf{I} \right)^{-1} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} tt^\dagger & \\ & t'^\dagger t' \end{pmatrix}$$

となるから $\frac{1}{\cosh x_n}$ が $t^\dagger t'$ および $t'^\dagger t'$ の固有値の絶対値をあたえることとなる。¹²

11

$$\begin{aligned} \mathbf{TT}^\dagger &= \begin{pmatrix} t^{\dagger-1} & r't'^{-1} \\ -t'^{-1}r & t'^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t^{-1} & -r^\dagger t'^{\dagger-1} \\ t'^{\dagger-1}r^\dagger & t'^{\dagger-1} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} t^{\dagger-1}t^{-1} + r't'^{-1}t'^{\dagger-1}r^\dagger & -t^{\dagger-1}r^\dagger t'^{\dagger-1} + r't'^{-1}t'^{\dagger-1} \\ -t'^{-1}rt^{-1} + t'^{-1}t'^{\dagger-1}r^\dagger & t'^{-1}rr^\dagger t'^{\dagger-1} + t'^{-1}t'^{\dagger-1} \end{pmatrix} \\ \mathbf{T}^{-1} &= \mathbf{JT}^\dagger \mathbf{J} \\ (\mathbf{TT}^\dagger)^{-1} &= (\mathbf{T}^{-1})^\dagger \mathbf{T}^{-1} = \mathbf{JTT}^\dagger \mathbf{J} \\ \mathbf{TT}^\dagger + (\mathbf{TT}^\dagger)^{-1} &= 2 \begin{pmatrix} t^{\dagger-1}t^{-1} + r't'^{-1}t'^{\dagger-1}r^\dagger & \\ & t'^{-1}rr^\dagger t'^{\dagger-1} + t'^{-1}t'^{\dagger-1} \end{pmatrix} \\ &= 2 \begin{pmatrix} (tt^\dagger)^{-1} + r'(t'^\dagger t')^{-1}r^\dagger & \\ & t'^{-1}rr^\dagger t'^{\dagger-1} + (t'^\dagger t')^{-1} \end{pmatrix} \\ &= 2 \begin{pmatrix} (tt^\dagger)^{-1} + r'(1 - r'^\dagger r')^{-1}r^\dagger & \\ & t'^{-1}rr^\dagger t'^{\dagger-1} + (t'^\dagger t')^{-1} \end{pmatrix} \\ &= 2 \begin{pmatrix} (tt^\dagger)^{-1} + (r'^{\dagger-1}r'^{-1} - 1)^{-1} & \\ & t'^{-1}rr^\dagger t'^{\dagger-1} + (t'^\dagger t')^{-1} \end{pmatrix} \\ \mathbf{TT}^\dagger + (\mathbf{TT}^\dagger)^{-1} + 2\mathbf{I} &= 2 \begin{pmatrix} (tt^\dagger)^{-1} + r'^{\dagger-1}r'^{-1}(r'^{\dagger-1}r'^{-1} - 1)^{-1} & \\ & t'^{-1}(t't'^\dagger + rr^\dagger)t'^{\dagger-1} + (t'^\dagger t')^{-1} \end{pmatrix} \\ &= 2 \begin{pmatrix} (tt^\dagger)^{-1} + (1 - r'r'^\dagger)^{-1} & \\ & 2(t'^\dagger t')^{-1} \end{pmatrix} = 4 \begin{pmatrix} (tt^\dagger)^{-1} & \\ & (t'^\dagger t')^{-1} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

よって

$$\left(\mathbf{TT}^\dagger + (\mathbf{TT}^\dagger)^{-1} + 2\mathbf{I} \right)^{-1} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} tt^\dagger & \\ & t'^\dagger t' \end{pmatrix}$$

12

$$(2 + e^{2x_n} + e^{-2x_n})^{-1} = ((e^{x_n} + e^{-x_n})^{-1})^2 = \frac{1}{4 \cosh x_n} \equiv \frac{1}{4} \begin{pmatrix} tt^\dagger & \\ & t'^\dagger t' \end{pmatrix}$$

1.2 グリーン関数と散乱の積分方程式

ここでは、シュレディンガー方程式を次のように書いてみる。

$$\begin{aligned}(E - H_0(x))\Psi(x) &= V(x)\Psi(x) \\ H_0(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}\end{aligned}$$

ここで $\delta(x)$ をディラックのデルタ関数として次のグリーン関数 $G_0(\xi)$ が求まったとすると

$$(E - H_0(\xi))G_0(\xi) = \delta(\xi)$$

斉次解 $\phi(x)$

$$(E - H_0(x))\Phi(x) = 0$$

をもちいて

$$\Psi(x) = \Phi(x) + \int_{-\infty}^{\infty} dy G_0(x-y)V(y)\Psi(y) \quad (\text{LS})$$

と書ける。¹³以下空間座標 x 依存性のかわりにエネルギー依存性をあらわに書いて、この計算を次のように形式的にかいてみよう。

$$\begin{aligned}(E - H_0)\Psi &= V\Psi, \\ (E - H_0)G_0(z) &= 1 \\ G_0(E) &= \frac{1}{E - H_0} \\ (E - H_0)\Phi &= 0 \\ \Psi &= \Phi + \frac{1}{E - H_0}V\Psi \\ &= \Phi + G_0V\Psi \quad (\text{LS})\end{aligned}$$

¹³これはシュレディンガー方程式に代入することですぐ確認できる。

この最後の式をリップマン-シュインガーの式という。^{14 15 16}

更に LS の式を変形すれば

$$\begin{aligned}\Psi &= (1 - G_0 V)^{-1} \Phi = (1 + G V) \Phi \\ G &= \frac{1}{E - H} \\ &= G_0 + G_0 V G = G_0 + G_0 (V G_0) + G_0 (V G_0)^2 + \dots\end{aligned}$$

¹⁴ここで演算子 $(z - H_0)$ の逆数は H_0 のエネルギー ϵ の固有状態 $|\epsilon\rangle$ をもちいて以下のように定義されていると考える。

$$G_0(z) = \sum_{\epsilon} \frac{1}{z - \epsilon} |\epsilon\rangle \langle \epsilon|$$

一般には $z = E$ の実のエネルギーに対しては $G_0(z)$ はここから見てとれる特異性のため定義されないので一般の複素エネルギー z に対して計算し最後に $z \rightarrow E \pm i\delta$ の極限をとる必要がある。この節では常にこの注意が必要である。(以下の具体的計算を確認の事)

¹⁵形式解と座標表示との間の関係は次のように考える。

$$\begin{aligned}(z - H_0)G_0 &= 1 \\ \langle x|(z - H_0)G_0|x'\rangle &= \langle x|x'\rangle \\ \int dx'' \int dp dp' \langle x|p\rangle \langle p|(z - H_0)|p'\rangle \langle p'|x''\rangle \langle x''|G_0|x'\rangle &= \langle x|x'\rangle\end{aligned}$$

ここで $\langle x|x'\rangle = \delta(x - x')$ は次のように \hat{x} 演算子の固有値 x' の固有関数であり $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$ とみなせる。

$$\hat{x}\langle x|x'\rangle = \int dx'' x \langle x|x''\rangle \langle x''|x'\rangle = \int dx'' x \delta(x - x'') \delta(x'' - x') = x' \delta(x - x') = x' \langle x|x'\rangle$$

また $\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$ は $\hat{p} = -i\hbar\partial_x$ 演算子の固有値 p の固有関数であり $\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$ とみなせる。なお完全性と規格直交性は次のとおりである。

$$\begin{aligned}\int dx'' \langle x|x''\rangle \langle x''|x''\rangle^* &= \int dx'' \delta(x - x'') \delta(x' - x'') = \delta(x' - x') \quad \text{完全性} \\ \int dx \langle x|x'\rangle^* \langle x|x''\rangle &= \int dx \delta(x - x') \delta(x - x'') = \delta(x' - x'') \quad \text{規格直交性} \\ \int dp \langle x|p\rangle \langle x'|p\rangle^* &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp e^{ip(x-x')/\hbar} = \frac{1}{\hbar} \delta((x-x')/\hbar) = \delta(x - x') \quad \text{完全性} \\ \int dx \langle x|p\rangle^* \langle x|p'\rangle &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx e^{-i(p-p')x/\hbar} = \delta(p - p') \quad \text{規格直交性}\end{aligned}$$

よって $\langle x|G_0|x'\rangle = G_0(x, x')$ として

$$\begin{aligned}\langle p|(z - H_0)|p'\rangle &= \langle p|(z - \frac{\hat{p}^2}{2m})|p'\rangle = \delta(p - p') (z - \frac{p^2}{2m}) \\ \int dx'' \int dp dp' \langle x|p\rangle \langle p|(z - H_0)|p'\rangle \langle p'|x''\rangle G_0(x'', x') &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx'' \int dp e^{ip(x-x'')} (z - \frac{p^2}{2m}) G_0(x'', x') \\ &= \left(z + \frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \int dx'' \delta(x - x'') G_0(x'', x') = \left(z + \frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) G_0(x, x')\end{aligned}$$

なお並進対称性より $G_0(x, x') = G_0(x - x')$

¹⁶平面波の種々の規格化についてまとめてみよう。

- まず一辺 L 体積 $V = L^3$ の箱の中で周期的境界条件を課せば

となる。¹⁷ ここで具体的な1次元のグリーン関数 G_0 をフーリエ解析の方法で求

$$\mathbf{k}_n = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z), \quad n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \text{ として}$$

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \mathbf{n} \rangle &= \psi_n(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}_n \cdot \mathbf{r}} \\ \langle \mathbf{n} | \mathbf{n}' \rangle &= \int_V d\mathbf{r} \psi_n^*(\mathbf{r}) \psi_{n'}(\mathbf{r}) = \delta_{nn'} : \text{規格化} \\ \sum_n \langle \mathbf{r} | \mathbf{n} \rangle \langle \mathbf{n} | \mathbf{r}' \rangle &= \sum_n \psi_n(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}') = \frac{1}{V} \sum_n e^{-i(\mathbf{k}_n - \mathbf{k}_{n'}) \cdot \mathbf{r}} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 \sum_n e^{-i(\mathbf{k}_n - \mathbf{k}_{n'}) \cdot \mathbf{r}} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} e^{-i(\mathbf{k}_n - \mathbf{k}_{n'}) \cdot \mathbf{r}} \\ &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle \\ \sum_n | \mathbf{n} \rangle \langle \mathbf{n} | &= 1 : \text{完全性} \end{aligned}$$

- 波数表示で連続極限をとって

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle &= \psi_k(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\ \text{つまり } | \mathbf{k} \rangle &= \sqrt{\frac{V}{(2\pi)^3}} | \mathbf{n} \rangle \\ \langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{r} \psi_k^*(\mathbf{r}) \psi_{k'}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') : \text{規格化} \\ \int d\mathbf{k} \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle \langle \mathbf{k} | \mathbf{r}' \rangle &= \int d\mathbf{k} \psi_k(\mathbf{r}) \psi_k^*(\mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_n e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \\ &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle \\ \int d\mathbf{k} | \mathbf{k} \rangle \langle \mathbf{k} | &= 1 : \text{完全性} \end{aligned}$$

- 運動量表示では

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle &= \psi_p(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / \hbar} \\ \text{つまり } | \mathbf{p} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{\hbar^3}} | \mathbf{k} \rangle = \sqrt{\frac{V}{(2\pi\hbar)^3}} | \mathbf{n} \rangle \\ \langle \mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{r} \psi_p^*(\mathbf{r}) \psi_{p'}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') : \text{規格化} \\ \int d\mathbf{p} \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \mathbf{r}' \rangle &= \int d\mathbf{p} \psi_p(\mathbf{r}) \psi_p^*(\mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \sum_n e^{-i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}') / \hbar} \\ &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle \\ \int d\mathbf{p} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | &= 1 : \text{完全性} \end{aligned}$$

¹⁷ここで以下の関係式を用いた。

$$\begin{aligned} A^{-1}(B - A)B^{-1} &= (A^{-1}B - 1)B^{-1} = A^{-1} - B^{-1} \\ &= -B^{-1}(A - B)A^{-1} = B^{-1}(B - A)A^{-1} \end{aligned}$$

これに $A = E - H_0$ 、 $B = E - H_0 - V$ 、を代入すると

$$-G_0 V G = G_0 - G = -G V G_0$$

よって $(1 - G_0 V)G = G_0$ つまり

$$(1 - G_0 V)^{-1} = G G_0^{-1} = (G_0 + G V G_0) G_0^{-1} = 1 + G V$$

また有用な関係式として

$$G = G_0 + G_0 V G = G_0 + G_0 (V G_0) + G_0 (V G_0)^2 + \dots$$

が得られる。

めると^{18 19 20}¹⁸空間座標をあらわにかいて、

$$G_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} \hat{G}_0(k)$$

とすると $\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{ikx}$ と書けるので

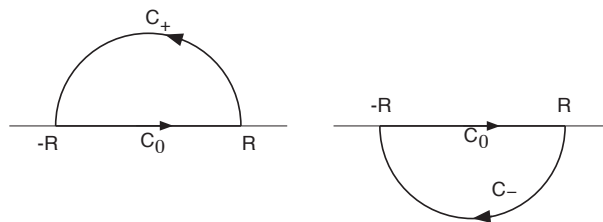
$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$$

として $(E - H_0)G_0(x) = \delta(x)$ より $\hat{G}_0(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \frac{1}{K^2 - k^2}$ よって

$$G_0(x) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{1}{K^2 - k^2} e^{ikx}$$

以下 E の正負で場合を分けて考えよう。¹⁹まず $E \geq 0$ の場合、この積分は実軸上の特異性のため不確定である。そこでエネルギー E を複素エネルギーに拡張することを考え $E \rightarrow E \pm i0$ とする。これは $K \rightarrow K \pm i0$ とすることに対応し、それに対応して

$$\begin{aligned} G_0^\pm(x) &= \frac{1}{2\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{1}{2K} \left(\frac{1}{k + K \pm i0} - \frac{1}{k - K \mp i0} \right) e^{ikx} \\ &= \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) i \frac{1}{2K} \times \begin{cases} \mp e^{\pm iKx} & (x > 0) \\ \mp e^{\mp iKx} & (x < 0) \end{cases} \\ &= \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \frac{\mp i}{2K} e^{\pm iK|x|} \end{aligned}$$

ここで積分は図のような経路 $C_0 + C_+$ もしくは $C_0 + C_-$ にそう複素積分を用いて評価し、以下のジョルダンの補題を用いる。 $|f(z)|$ が上(下)半面において $|z| \rightarrow \infty$ のとき一様に 0 となるときの

$$\int_{C_\pm} dz f(z) e^{\pm iaz} \rightarrow 0, \quad (R \rightarrow \infty, a > 0)$$

²⁰次に $E < 0$ の場合

$$K = i\kappa = i \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}, \quad \kappa > 0$$

とすれば積分をそのまま評価でき、明らかに $K \rightarrow K + i0$ ($E \rightarrow E + i0$) とした場合を採用すれば

$$G_0(E) = \begin{cases} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \frac{\mp i}{2K} e^{\pm iK|x|}, & K \rightarrow K \pm i0 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \pm i0, \quad E \rightarrow E \pm i0, E > 0 \\ \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \frac{-1}{2\kappa} e^{-\kappa|x|}, & \kappa = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}, \quad E < 0 \end{cases}$$

となる。²¹ エネルギー $E > 0$ の場合このグリーン関数および斉次解として $+x$ 方向の進行波 $\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$ をとりリップマン-シュインガーの式に代入すると

$$\Psi^\pm(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} + \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \frac{(\mp i)}{2k} \int_{-\infty}^{\infty} dy V(y) e^{\pm ik|x-y|} \Psi^\pm(y)$$

以後前節 I の境界条件を満たす解を考えるとそれは $\Psi^+(x)$ であることがわかる。この $\Psi^+(x)$ に関して $x \ll -a$ においては、

$$\begin{aligned} \Psi^+(x) &\approx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(e^{ikx} + e^{-ikx} f(k, -\infty) \right) \\ f(k, -\infty) &= \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \frac{-i\sqrt{2\pi}}{2k} \int_{-\infty}^{\infty} dy V(y) e^{iky} \Psi^+(y) \end{aligned}$$

$a \ll x$ においては、

$$\begin{aligned} \Psi^+(x) &\approx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(e^{ikx} (1 + f(k, \infty)) \right) \\ f(k, \infty) &= \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \frac{-i\sqrt{2\pi}}{2k} \int_{-\infty}^{\infty} dy V(y) e^{-iky} \Psi^+(y) \end{aligned}$$

となる。これから反射係数 (\mathcal{R})、透過係数 (\mathcal{T}) が

$$\mathcal{R} = f(k, -\infty), \quad \mathcal{T} = 1 + f(k, \infty)$$

と定まる。より具体的な表式を求めるには、 Ψ^+ の具体的な形が必要であるが、右辺で $\Psi^+(x) \approx \Phi(x)$ とする近似をボルン近似という。

良く

$$\begin{aligned} G_0^+(x) &= \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \frac{-i}{2K} e^{iK|x|} \\ &= \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \frac{-1}{2\kappa} e^{-\kappa|x|} \end{aligned}$$

となる。

²¹ なおこの解は斉次解 $e^{\pm ikx}$ の線形結合の分だけ不定であることに注意しよう。この不定性は以下考える斉次解をどうとるかに吸収される。

積分方程式による1次元デルタ関数型ポテンシャルでの散乱問題

デルタ関数型ポテンシャル中 $V(x) = g\delta(x)$ での散乱問題の具体的な計算をここで示そう。以下の散乱の積分方程式より

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} + \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \frac{(-i)}{2k} \int_{-\infty}^{\infty} dy V(y) e^{ik|x-y|} \Psi(y)$$

$$\Psi(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} - i\tilde{g} \frac{1}{2k} e^{-ikx} \Psi(0), & x < 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} - i\tilde{g} \frac{1}{2k} e^{ikx} \Psi(0), & x > 0 \end{cases}$$

$x = 0$ として

$$\Psi(0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{1 + i\tilde{g} \frac{1}{2k}}$$

よって

$$\mathcal{T} = 1 - \frac{i}{2k} \tilde{g} \frac{1}{1 + i\tilde{g} \frac{1}{2k}} = \frac{1}{1 + \frac{i\tilde{g}}{2k}}, \quad \mathcal{R} = -\frac{\frac{i\tilde{g}}{2k}}{1 + \frac{i\tilde{g}}{2k}}$$

1.3 1次元におけるレビンソンの定理

ここでは束縛状態の個数と散乱状態とを結びつける Levinson の定理について述べよう。そのためシュレディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 f_{\pm\infty}}{dx^2} + V(x) f_{\pm\infty} = E f_{\pm\infty} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} f_{\pm\infty}$$

に対する次の新しい境界条件とその解を考えよう。

- $f_{\infty}(k, x) \rightarrow e^{ikx}, x \rightarrow \infty$
- $f_{-\infty}(k, x) \rightarrow e^{-ikx}, x \rightarrow -\infty$

これらの解に対する積分方程式を求めるため、グリーン関数として次のものをとろう。

$$G_{\infty} = G_1 = -\frac{2m}{\hbar^2} \theta(x' - x) \frac{\sin k(x - x')}{k}$$

$$G_{-\infty} = G_2 = \frac{2m}{\hbar^2} \theta(x - x') \frac{\sin k(x - x')}{k}$$

22 23

²²グリーン関数を前とは異なる方法で求めてみよう。一般に $y = y(x)$ に関する2階の微分方程式のグリーン関数を考える。

$$G''(x, x') + p(x)G'(x, x') + q(x)G(x, x') = \delta(x - x'), \quad ' \text{ は } x \text{ 微分}$$

ただし独立な斉次解 $y_+(x), y_-(x)$ は求まっているとする。

$$y_i'' + p(x)y_i' + q(x)y_i = 0, \quad i = +, -$$

そこで定数変化法により、

$$G = C_+y_+ + C_-y_-$$

とすると、

$$G' = (C'_+y_+ + C'_-y_-) + (C_+y'_+ + C_-y'_-)$$

ここで

$$(C'_+y_+ + C'_-y_-) = 0$$

を要求して

$$G'' = (C_+y'_+ + C_-y'_-)' = (C'_+y'_+ + C'_-y'_-) + (C_+y''_+ + C_-y''_-)$$

よって

$$\begin{aligned} G'' + pG' + qG &= C_+(y''_+ + py'_+ + qy_+) + C_-(y''_- + py'_- + qy_-) \\ &\quad + C'_+y'_+ + C'_-y'_- = C'_+y'_+ + C'_-y'_- = \delta(x - x') \end{aligned}$$

これより

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} y_+ & y_- \\ y'_+ & y'_- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C'_+ \\ C'_- \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 \\ \delta(x - x') \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} C'_+ \\ C'_- \end{pmatrix} &= \frac{1}{W} \begin{pmatrix} y'_- & -y_- \\ -y'_+ & y_+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \delta(x - x') \end{pmatrix} = \frac{1}{W} \begin{pmatrix} -y_- \delta(x - x') \\ y_+ \delta(x - x') \end{pmatrix} \\ W &= W(y_+, y_-) \end{aligned}$$

ゆえに

$$G(x, x') = \int_{b_-}^x dt \frac{-y_+(x)y_-(t)}{W(t)} \delta(t - x') + \int_{b_+}^x dt \frac{y_-(x)y_+(t)}{W(t)} \delta(t - x')$$

ここで b_+, b_- は積分定数で異なる境界条件を与える。

²³以下いくつかの場合を考えよう。

- $b_- = b_+ = x' - 0$ とすると

$$G_2(x, x') = \theta(x - x') \frac{-y_+(x)y_-(x') + y_-(x)y_+(x')}{W(x')}$$

- $b_- = b_+ = x' + 0$ とすると

$$G_1(x, x') = \theta(x' - x) \frac{y_+(x)y_-(x') - y_-(x)y_+(x')}{W(x')}$$

- $b_- = \infty, b_+ = -\infty$ とすると

これらに対して各々斉次解をくわえて次の積分方程式が得られる。

$$f_{\infty}(k, x) = e^{+ikx} - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{k} \int_x^{\infty} dx' \sin k(x-x') V(x') f_{\infty}(k, x')$$

$$f_{-\infty}(k, x) = e^{-ikx} + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{k} \int_{-\infty}^x dx' \sin k(x-x') V(x') f_{-\infty}(k, x')$$

各々境界条件をみたすことはすぐに見て取れる。

ここでこれらの関数 $f_{\pm\infty}(k, x)$ を複素数 k の関数と見たときの解析性を調べておこう。まずこの積分方程式から複素数 k について

$$\text{Im } k > 0$$

であれば $f_{\pm\infty}(k, x)$ を逐次近似したときの積分が各項で収束することもわかるであろう。実はこのときこの級数自体も収束し $f_{\pm\infty}(k, x)$ は複素 k 平面上、上半平面で k について正則な関数となる。

この $f_{\infty}(k, x)$ と $f_{\infty}(-k, x)$ および $f_{-\infty}(k, x)$ と $f_{-\infty}(-k, x)$ およびはそのロンスキー行列式を $x \rightarrow \infty$ で評価して

$$W(f_{\infty}(k, x), f_{\infty}(-k, x)) = -2ik$$

$$W(f_{-\infty}(k, x), f_{-\infty}(-k, x)) = 2ik$$

$$G(x, x') = \int_x^{\infty} dt \frac{y_+(x)y_-(t)}{W(t)} \delta(t-x') + \int_{-\infty}^x dt \frac{by_-(x)y_+(t)}{W(t)} \delta(t-x')$$

$$= \frac{y_+(\xi_{<})y_-(\xi_{>})}{W(x')}$$

$$\xi_{>} = \max(x, x'), \quad \xi_{<} = \min(x, x')$$

特に

$$(E - H_0)G_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(k^2 + \frac{d^2}{dx^2} \right) G_0'' = \delta(x - x')$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

に対しては $y_{\pm}(x) = e^{i\pm x}$ として $W(y_+, y_-) = \det \begin{pmatrix} e^{ikx} & e^{-ikx} \\ ik e^{ikx} & -ik e^{-ikx} \end{pmatrix} = -2ik$ であり、

•

$$\frac{\hbar^2}{2m} G_2(x, x') = \theta(x - x') \frac{\sin k(x - x')}{k}$$

•

$$\frac{\hbar^2}{2m} G_1(x, x') = -\theta(x' - x) \frac{\sin k(x - x')}{k}$$

となる。

であるから $k \neq 0$ で独立であり次のような展開が行える。²⁴

$$\begin{aligned} f_{-\infty}(k, x) &= c_{11}(k)f_{\infty}(k, x) + c_{12}(k)f_{\infty}(-k, x) \\ f_{\infty}(k, x) &= c_{21}(k)f_{-\infty}(-k, x) + c_{22}(k)f_{-\infty}(k, x) \end{aligned}$$

この第2式で $x \rightarrow \pm\infty$ を考えると

$$c_{21}e^{ikx} + c_{22}e^{-ikx} \quad (x \rightarrow -\infty), \quad e^{ikx} \quad (x \rightarrow \infty)$$

となることを意味しておりこれは散乱の境界条件を満たす解であり、透過係数、反射係数と次のような関係にある。

$$\begin{aligned} \mathcal{R} &= \frac{c_{22}}{c_{21}} \\ \mathcal{T} &= \frac{1}{c_{21}} = \frac{1}{T_{11}} : \text{転送行列の節参照} \end{aligned}$$

ここで $f_{\mp\infty}(k, x)$ の各表式と $f_{\pm\infty}(\pm k, x)$ とのロンスキー行列式を考えると次の関係式が導ける。

$$\begin{aligned} c_{11}(k) &= -\frac{1}{2ik}W(f_{-\infty}(k, x), f_{\infty}(-k, x)) \\ c_{12}(k) &= \frac{1}{2ik}W(f_{-\infty}(k, x), f_{\infty}(k, x)) \\ c_{21}(k) &= -\frac{1}{2ik}W(f_{\infty}(k, x), f_{-\infty}(k, x)) \\ c_{22}(k) &= \frac{1}{2ik}W(f_{\infty}(k, x), f_{-\infty}(-k, x)) \end{aligned}$$

特に $c_{21}(k)$ の表式は複素 k 平面上の上半面で正則な $f_{\pm\infty}(k, x)$ で表現されているから $c_{21}(k)$ も上半面で正則でありその上半面でのゼロ点 k_B が \mathcal{T} の極すなわち束縛状態を与えることとなる。

さらに $c_{21}(k)$ については次の事実が示せる。

²⁴逐次代入して

$$\begin{aligned} f_{-\infty}(k) &= c_{11}(k)(c_{21}(k)f_{-\infty}(-k) + c_{22}(k)f_{-\infty}(k)) + c_{12}(k)(c_{21}(-k)f_{-\infty}(k) + c_{22}(-k)f_{-\infty}(-k)) \\ &= (c_{11}(k)c_{22}(k) + c_{12}(k)c_{21}(-k))f_{-\infty}(k) + (c_{11}(k)c_{21}(k) + c_{12}(k)c_{22}(-k))f_{-\infty}(-k) \end{aligned}$$

より $k \neq 0$ で

$$c_{11}(k)c_{22}(k) + c_{12}(k)c_{21}(-k) = 1, \quad c_{11}(k)c_{21}(k) + c_{12}(k)c_{22}(-k) = 0$$

同様に

$$\begin{aligned} f_{\infty}(k) &= c_{21}(k)(c_{11}(-k)f_{\infty}(-k) + c_{12}(-k)f_{\infty}(k)) + c_{22}(k)(c_{11}(k)f_{\infty}(k) + c_{12}(k)f_{\infty}(-k)) \\ &= (c_{12}(-k)c_{21}(k) + c_{11}(k)c_{22}(k))f_{\infty}(k) + (c_{11}(-k)c_{21}(k) + c_{12}(k)c_{22}(k))f_{\infty}(-k) \end{aligned}$$

より

$$c_{12}(-k)c_{21}(k) + c_{11}(k)c_{22}(k) = 1, \quad c_{11}(-k)c_{21}(k) + c_{12}(k)c_{22}(k) = 0$$

- $|k| \rightarrow \infty$ の時、 $c_{21}(k) = 1 + \mathcal{O}(\frac{1}{k})$

これは $|k| \rightarrow \infty$ すなわち入射エネルギーが十分大きいときはポテンシャルからの影響が無視できるため透過係数が $\mathcal{T} \rightarrow 1$ となることおよび解析性からわかる。

- $c_{21}(k)$ のゼロ点 k_B は実軸上には存在せず、虚軸上にある。²⁵

²⁵ 転送行列の議論から明らか

- $c_{21}(k)$ のゼロ点 k_B はすべて 1 位である。すなわち $\dot{c}_{21}(k_B) \neq 0$ ²⁶

これより $\frac{d}{dk} \log c_{21}(k)$ を実軸と上半面の半円からなる積分路 C で積分することにより ($\frac{\dot{c}_{21}}{c_{21}} = \mathcal{O}(\frac{1}{k^2})$, $|k| \rightarrow \infty$ より半円からの寄与は消えて) 上半面にある c_{21} のゼロ点の数 N は偏角の原理から

²⁶まず束縛状態をあたえる波数 k_B で $f_{\pm\infty}(k_B, x)$ はお互いに 1 次従属となる。

$$\begin{aligned} c_{21}(k_B) &= 0, & c_{11}(k_B)c_{22}(k_B) &= 1, & c_{11}(k_B) &\neq 0, & c_{22}(k_B) &\neq 0 \\ f_{\infty}(k_B, x) &= c_{22}(k_B)f_{-\infty}(k_B, x) \\ W(f_{\infty}(k_B, x), f_{-\infty}(k_B, x)) &= 0 \end{aligned}$$

よって k 微分を $\dot{}$ で書いて

$$\begin{aligned} \dot{c}_{21}(k_B) &= -\frac{1}{2ik_B} \left(W(\dot{f}_{\infty}(k_B, x), f_{-\infty}(k_B, x)) + W(f_{\infty}(k_B, x), \dot{f}_{-\infty}(k_B, x)) \right) \\ &= -\frac{1}{2ik_B} \left(\frac{1}{c_{22}} W(\dot{f}_{\infty}(k_B, x), f_{\infty}(k_B, x)) + c_{22} W(f_{-\infty}(k_B, x), \dot{f}_{-\infty}(k_B, x)) \right) \end{aligned}$$

これを評価するためにシュレディンガー方程式とそれを k で微分して

$$\begin{aligned} f'' + k^2 f &= \frac{2m}{\hbar^2} V f \\ \dot{f}'' + 2kf + k^2 \dot{f} &= \frac{2m}{\hbar^2} V \dot{f} \end{aligned}$$

これらからポテンシャルの項を消去すれば

$$f'' \dot{f} - \dot{f}'' f - 2kf^2 = \frac{d}{dx} W(\dot{f}, f) - 2kf^2 = 0$$

これを f_{∞} に使って $\text{Im } k > 0$ のとき $\lim_{x \rightarrow \infty} f_{\infty}(k, x) = 0$ から

$$W(\dot{f}_{\infty}, f_{\infty}) = -2k \int_x^{\infty} dx' [f_{\infty}(k, x')]^2$$

同様に $\text{Im } k > 0$ のとき $\lim_{x \rightarrow -\infty} f_{-\infty}(k, x) = 0$ から

$$W(\dot{f}_{-\infty}, f_{-\infty}) = 2k \int_{-\infty}^x dx' [f_{-\infty}(k, x')]^2$$

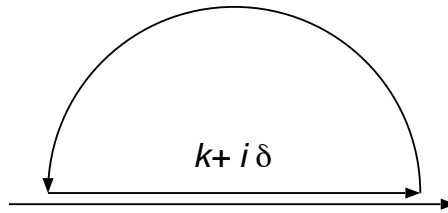
よって

$$\begin{aligned} \dot{c}_{21}(k_B) &= -\frac{1}{2ik_B} \left(-\frac{1}{c_{22}(k_B)} 2k_B \int_x^{\infty} dx' [f_{\infty}(k_B, x')]^2 + c_{22}(k_B) (-2k_B) \int_{-\infty}^x dx' [f_{-\infty}(k_B, x')]^2 \right) \\ &= -i \int_{-\infty}^{\infty} dx' [f_{\infty}(k_B, x') f_{-\infty}(k_B, x')] \\ &= -i c_{22}(k_B) \int_{-\infty}^{\infty} dx' [f_{-\infty}(k_B, x')]^2 = -i \frac{1}{c_{22}(k_B)} \int_{-\infty}^{\infty} dx' [f_{\infty}(k_B, x')]^2 \end{aligned}$$

これより $i\dot{c}_{21}(k_B)c_{22}(k_B)$ は束縛状態 $f_{\infty}(k_B, x)$ のノルムをあたえており零でない。

$$\begin{aligned}
 N &= \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{d}{dk} \log c_{21}(k) = \frac{1}{2\pi i} \log c_{21}(k+i0) \Big|_{k=-\infty}^{\infty} \\
 &= \frac{1}{2\pi} \left(\text{Arg } c_{21}(-\infty+i0) - \text{Arg } c_{21}(\infty+i0) \right) \\
 &= \frac{1}{2\pi} \left(\text{Arg } T_{11}(-\infty+i0) - \text{Arg } T_{11}(\infty+i0) \right) \\
 &= -\frac{1}{2\pi} \left(\text{Arg } \mathcal{T}(-\infty+i0) - \text{Arg } \mathcal{T}(\infty+i0) \right)
 \end{aligned}$$

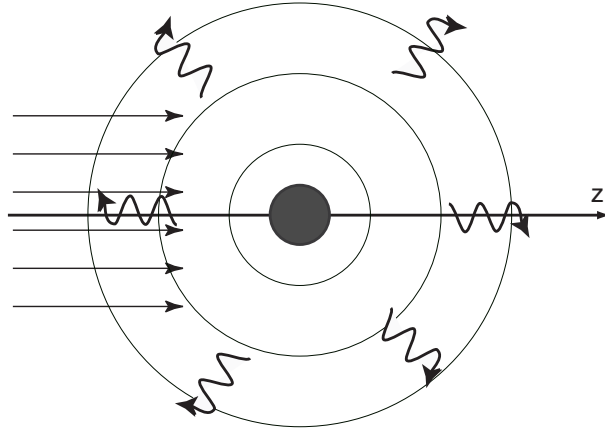
ここで偏角の変化は実軸上無限小だけ上半面にずれた直線上で数えるものとする。



この N は束縛状態の数でありこれが散乱状態の情報である透過係数 \mathcal{T} (を複素 k 平面へ解析接続したもの) から定まることとなる。これをレビンソンの定理とよぶ。

2 三次元の散乱理論

ここでは前節で紹介した1次元系散乱理論、特に積分方程式による方法に従って三次元の散乱理論を議論する。具体的には、原点近傍に球対称の散乱体があり z 軸正方向へ平面波が入射している状況を考える。



2.1 散乱振幅と微分断面積

この状況における定常状態の境界条件として次のものを要求する。

$$\Psi(\vec{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left(e^{ikz} + \frac{f(\theta)}{r} e^{ikr} \right)$$

これは $mv = \hbar k$, $V_0 = (2\pi)^3$ として^{27 28}

²⁷ $\Psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$ は $\int_{-\pi}^{\pi} dx \int_{-\pi}^{\pi} dy \int_{-\pi}^{\pi} dz |\Psi|^2 = 1$ よりわかるように体積 $v_0 = (2\pi)^3$ ごとに一粒子が存在することを意味する。

²⁸

$$\vec{\nabla} f = \frac{\partial f}{\partial r} \hat{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} \hat{\theta} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \phi} \hat{\phi}$$

より

$$\begin{aligned} \Psi_s^* \vec{\nabla} \Psi_s &= \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{f^*(\theta)}{r} e^{-ikr} \left(-\frac{f(\theta)}{r^2} e^{ikr} \hat{r} + \frac{f(\theta)}{r} e^{ikr} ik \hat{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial f(\theta)}{\partial \theta} \frac{1}{r} e^{ikr} \hat{\theta} \right) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{|f|^2}{r^2} ik \hat{r} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r^2}\right) \end{aligned}$$

$$\Psi_0 = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{ikz}$$

$$\vec{j}_0 = \left(\frac{\hbar}{2mi} \right) \left(\Psi_0^* \vec{\nabla} \Psi_0 - (\vec{\nabla} \Psi_0^*) \Psi_0 \right) = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\hbar k}{m} \hat{z} = \frac{v}{V_0} \hat{z}$$

$$\Psi_s = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{f(\theta)}{r} e^{ikr}$$

$$\vec{j}_s = \left(\frac{\hbar}{2mi} \right) \left(\Psi_s^* \vec{\nabla} \Psi_s - (\vec{\nabla} \Psi_s^*) \Psi_s \right) = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{|f(\theta)|^2 \hbar k}{r^2 m} \hat{r} + o\left(\frac{1}{r^2}\right) \approx \frac{v}{V_0} \frac{|f(\theta)|^2}{r^2} \hat{r}$$

とかけることから無限遠では平面波と球面波の重ね合わせとなることを境界条件として要求することになる。

この $f(\theta)$ を散乱振幅という。ここで単位面積あたりの入射フラックス $\Phi_0 = \vec{j}_z \cdot \hat{z}$ と面積要素 $d\vec{S} = r^2 d\vec{\Omega}$ ($d\vec{\Omega} = d\Omega \hat{r}$) あたりの散乱されたフラックス $\Phi_s = \vec{j}_s \cdot d\vec{S}$ との比として微分散乱断面積 $\sigma(\theta)$ を

$$\Phi_s = \sigma(\theta) d\Omega \cdot \Phi_0$$

とすると

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

となる。なお $\sigma_T = \int d\Omega \sigma(\theta)$ を全散乱断面積という。

ここで時間に依存するシュレディンガー方程式の解である波動関数 $\Psi(\vec{r}, t)$ に対して連続の方程式

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(\vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) &= 0 \\ \rho(\vec{r}, t) &= |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \\ \vec{j}(\vec{r}, t) &= \frac{\hbar}{2mi} \left(\Psi^*(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \Psi(\vec{r}, t) - h.c. \right) \end{aligned}$$

が成り立つことが示せる。²⁹ これよりここで議論している定常状態の波動関数に対しては

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) = 0$$

²⁹ある任意の体積領域 V 内の粒子数 N の時間変化 $\partial_t N = \partial_t \int_V d\vec{r} |\Psi(\vec{r})|^2$ の表式にシュレディンガー方程式を使って

$$\begin{aligned} \partial_t N &= \int d\vec{r} \left(\dot{\Psi}^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) + \Psi^*(\vec{r}) \dot{\Psi}(\vec{r}) \right) = \int_V d\vec{r} \frac{1}{i\hbar} \left(-H \Psi^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) + \Psi(\vec{r}) H \Psi^*(\vec{r}) \right) \\ &= - \left(\frac{\hbar}{2mi} \right) \int_V d\vec{r} \left(-(\nabla^2 \Psi^*(\vec{r})) \Psi(\vec{r}) + \Psi^*(\vec{r}) \nabla^2 \Psi(\vec{r}) \right) \\ &= - \left(\frac{\hbar}{2mi} \right) \int_{\partial V} d\vec{S} \left(-(\vec{\nabla} \Psi^*(\vec{r})) \Psi(\vec{r}) + \Psi^*(\vec{r}) \vec{\nabla} \Psi(\vec{r}) \right) = - \int_{\partial V} d\vec{S} \vec{j}(\vec{r}) \\ \vec{j}(\vec{r}) &= \left(\frac{\hbar}{2mi} \right) \left[\Psi^*(\vec{r}) \vec{\nabla} \Psi(\vec{r}) - (\vec{\nabla} \Psi^*(\vec{r})) \Psi(\vec{r}) \right] \end{aligned}$$

これは \vec{j} がカレント演算子であることを示しており、領域 V が任意であったことを使うと連続の

となる。これを原点中心の半径 R の大きな球面 S_R で囲まれる領域で積分してガウスの定理から³⁰

方程式

$$\partial_t |\Psi(\vec{r})|^2 + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$$

が従う。これは直接もでる。

³⁰球面波の無限遠での振る舞いを束縛状態での波動関数から解析接続により統一的に記述することを考えると

$$\Psi(\vec{r}) \longrightarrow \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left(e^{ikz} + \frac{f(\theta)}{r} e^{ik^+r} \right)$$

$$k^+ = k + i0 = k + i\epsilon$$

とする。さらに $R\epsilon \gg 1$ を仮定しよう。つまり系の大きさを最初に無限大としその後、最後に $\epsilon \rightarrow 0$ の極限をとることとする。よって

$$\begin{aligned} \Psi &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left(e^{ikr \cos \theta} + \frac{f}{r} e^{ik^+r} \right) \\ V_0 \Psi^* \nabla \Psi \Big|_{r=R} &= \left(e^{-ikr \cos \theta} + \frac{f^*}{r} e^{-ik^-r} \right) \left(ik e^{ikr \cos \theta} + ik \frac{f}{r} e^{ik^+r} \right) \hat{r} \Big|_{r=R} + \mathcal{O}(1/R^2) \\ &= \left(ik \cos \theta + ik \frac{f^*}{R} \cos \theta e^{iR(k \cos \theta - k^-)} + ik \frac{f}{R} e^{-iR(k \cos \theta - k^+)} \right) \hat{r} \\ &= \left(ik \cos \theta + ik \frac{f^*}{R} \cos \theta e^{ikR(\cos \theta - 1) - \epsilon R} + ik \frac{f}{R} e^{-ikR(\cos \theta - 1) - \epsilon R} \right) \hat{r} \\ V_0 \Psi^* \nabla \Psi \Big|_{r=R} - h.c. &= \left(2ik \cos \theta + ik \frac{f^*}{R} (1 + \cos \theta) e^{ikR(\cos \theta - 1) - \epsilon R} + ik \frac{f}{R} (1 + \cos \theta) e^{-ikR(\cos \theta - 1) - \epsilon R} \right) \hat{r} \end{aligned}$$

以下 $(1/R^2)$ の高次の項は無視して

$$\begin{aligned} 0 &= \int_S d\vec{S} \cdot \vec{j}_\infty \\ &= \left(\frac{\hbar}{2mi} \right) \int_S dS \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial r} - h.c. \right) \\ &= \int_S d\vec{S} (\hat{z} \vec{j}_0 - \hat{z} \vec{j}_0) + \int d\Omega \left[R^2 \cdot \frac{v}{V_0} \frac{|f(\theta)|^2}{R^2} \right] + \mathcal{O} \left(\frac{1}{R} \right) \\ &+ \left(\frac{\hbar}{2mi} \right) \int d\hat{\Omega} R^2 \frac{1}{(2\pi)^3} \left(e^{-ikz} (ik) \frac{f(\theta)}{R} e^{ikR} \hat{r} + \frac{f^*(\theta)}{R} e^{-ikR} (ik) e^{ikz} \hat{z} - h.c. \right) \\ &= \frac{v}{V_0} \int d\Omega |f(\theta)|^2 \\ &+ \left(\frac{i\hbar k}{2mi} \right) \int d\Omega R^2 \frac{1}{(2\pi)^3} \left(e^{ikR(1-\cos \theta)} \frac{f(\theta)}{R} + \frac{f^*(\theta)}{R} e^{-ikR(1-\cos \theta)} \cos \theta \right. \\ &\quad \left. + e^{-ikR(1-\cos \theta)} \frac{f^*(\theta)}{R} + \frac{f(\theta)}{R} e^{ikR(1-\cos \theta)} \cos \theta \right) \\ &= \frac{v}{V_0} \int d\Omega |f(\theta)|^2 + \frac{\hbar k}{2m} \frac{1}{(2\pi)^3} R \int d\Omega (1 + \cos \theta) (f(\theta) e^{ikR(1-\cos \theta)} + f^*(\theta) e^{-ikR(1-\cos \theta)}) \\ &= \frac{v}{V_0} \int d\Omega |f(\theta)|^2 + \frac{\hbar k}{2m} \frac{1}{(2\pi)^3} R^2 \cdot 2\pi \frac{1}{kR} i(f(0) - f^*(0)) + \text{const.} e^{\pm ikR} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\int d\Omega e^{ikR(1-\cos\theta)} f(\theta) &= 2\pi f(0) \int_0^\pi d\theta \sin\theta e^{ikR(1-\cos\theta)} f(\theta) \rightarrow 2\pi f(0) \int_{-1}^1 dt e^{ikR(1-t)}, \quad kR \rightarrow \infty \\
&= 2\pi f(0) \frac{1}{-ikR} e^{ikR(1-t)} \Big|_{-1}^1 = 2\pi f(0) \frac{i}{kR} (1 - e^{-2ikR}) \\
&= 2\pi \frac{1}{kR} i f(0) + \text{const.} e^{-2ikR} \\
\int d\Omega e^{-ikR(1-\cos\theta)} f^*(\theta) &= -2\pi \frac{1}{kR} i f^*(0) + \text{const.} e^{2ikR}
\end{aligned}$$

³²以下が通常の議論である。

$$\begin{aligned}
0 &= \int_S d\vec{S} \cdot \vec{j}_\infty \\
&= \left(\frac{\hbar}{2mi} \right) \int_S dS \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial r} - h.c. \right) \\
&= \int_S d\vec{S} (\hat{z} \vec{j}_0 - \hat{z} \vec{j}_0) + \int d\Omega \left[R^2 \cdot \frac{v}{V_0} \frac{|f(\theta)|^2}{R^2} \right] + \mathcal{O} \left(\frac{1}{R} \right) \\
&+ \left(\frac{\hbar}{2mi} \right) \int d\hat{\Omega} R^2 \frac{1}{(2\pi)^3} \left(e^{-ikz} (ik) \frac{f(\theta)}{R} e^{ikR} \hat{r} + \frac{f^*(\theta)}{R} e^{-ikR} (ik) e^{ikz} \hat{z} - h.c. \right) \\
&= \frac{v}{V_0} \int d\Omega |f(\theta)|^2 \\
&+ \left(\frac{i\hbar k}{2mi} \right) \int d\Omega R^2 \frac{1}{(2\pi)^3} \left(e^{ikR(1-\cos\theta)} \frac{f(\theta)}{R} + \frac{f^*(\theta)}{R} e^{-ikR(1-\cos\theta)} \cos\theta \right. \\
&\quad \left. + e^{-ikR(1-\cos\theta)} \frac{f^*(\theta)}{R} + \frac{f(\theta)}{R} e^{ikR(1-\cos\theta)} \cos\theta \right) \\
&= \frac{v}{V_0} \int d\Omega |f(\theta)|^2 + \frac{\hbar k}{2m} \frac{1}{(2\pi)^3} R \int d\Omega (1 + \cos\theta) (f(\theta) e^{ikR(1-\cos\theta)} + f^*(\theta) e^{-ikR(1-\cos\theta)}) \\
&= \frac{v}{V_0} \int d\Omega |f(\theta)|^2 + \frac{\hbar k}{2m} \frac{1}{(2\pi)^3} R^2 \cdot 2\pi \frac{1}{kR} i (f(0) - f^*(0)) + \text{const.} e^{\pm ikR}
\end{aligned}$$

これを R の微小領域で平均すれば最後の項は落ちて

$$0 = \frac{v}{V_0} \int d\Omega |f(\theta)|^2 + \frac{v}{V_0} \frac{4\pi}{k} (-) \text{Im} f(0)$$

$$\begin{aligned}
\vec{j}_\infty &= \left(\frac{\hbar}{2mi} \right) \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial r} - h.c. \right) \\
0 &= \int_S d\vec{S} \cdot \vec{j}_\infty \\
&= \left(\frac{\hbar}{2mi} \right) \int_S dS \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial r} - h.c. \right) \\
&= \int_S d\vec{S} (\hat{z} \vec{j}_0 - \hat{z} \vec{j}_0) + \int d\Omega \left[R^2 \cdot \frac{v}{V_0} \frac{|f(\theta)|^2}{R^2} \right] + \mathcal{O} \left(\frac{1}{R} \right) \\
&+ \left(\frac{\hbar}{2mi} \right) \int d\hat{\Omega} R^2 \frac{1}{(2\pi)^3} \left(e^{-ikz} (ik) \frac{f(\theta)}{R} e^{ikR \hat{r}} + \frac{f^*(\theta)}{R} e^{-ikR} (ik) e^{ikz} \hat{z} - h.c. \right)
\end{aligned}$$

これを R の微小領域で平均して

$$\text{Im } f(0) = \frac{k}{4\pi} \int d\Omega |f(\theta)|^2 = \frac{k}{4\pi} \sigma_T$$

この前方散乱振幅と全散乱断面積の関係を光学定理とよぶ。

2.2 リップマン-シュインガーの式と散乱振幅

前節で議論したリップマン-シュインガーの積分方程式をもちいて散乱振幅を求めることを考えよう。まず3次元の自由粒子系のグリーン関数は $G_0(\vec{r}) = G_0^\pm(\vec{r}, E)$ は次の方程式の解として定義され、

$$\begin{aligned}
(E - H_0(\vec{r}))G_0(\vec{r}) &= \delta(\vec{r}) \\
H_0(x) &= -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m}
\end{aligned}$$

具体的な関数形を前節と同様にフーリエ解析の方法で求めると³³

$$G_0(E) = \begin{cases} G_0^\pm(\vec{r}) = -\left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) \frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm iKr}}{r}, & K \rightarrow K \pm i0 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \pm i0, \quad E \rightarrow E \pm i0, E > 0 \\ G_0^+(\vec{r}, K \leftarrow i\kappa) = -\left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) \frac{1}{4\pi} \frac{e^{-\kappa r}}{r}, & \kappa = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}, \quad E < 0 \end{cases}$$

³³まず $E \geq 0$ の場合

$$E \pm i0 = \frac{\hbar^2 K_\pm^2}{2m}, \quad G_0^\pm(x) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k \hat{G}_0^\pm(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

とにおいて定義式と $\delta(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$ より $\hat{G}_0^\pm(\vec{k}) = \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{K^2 - k^2}$ よって

$$G_0^\pm(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) \int d^3k \frac{1}{K^2 - k^2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

となる。ここでは、まず散乱状態を考え $E > 0$ として斉次解として z 軸正方向へ進む平面波 $\Phi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{ikz}$ をとるとリップマンシュインガーの積分方程式は記号的には

$$\Psi^\pm = \Phi + \frac{1}{E \pm i0 - H_0} V \Psi^\pm$$

より具体的には

$$\Psi^\pm(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{ikz} - \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \frac{1}{4\pi} \int d\vec{r}' \frac{e^{\pm ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} V(\vec{r}') \Psi^\pm(\vec{r}')$$

となる。

ここで散乱体が有限の大きさ ($V(\vec{r}) \approx 0, r \gg a$) であり散乱体から十分離れた位置の波動関数を考えることにする。 $r \gg a, r' \approx a$ とすると³⁴

$$\begin{aligned} |\vec{r} - \vec{r}'| &= r - \hat{r} \cdot \vec{r}' + \mathcal{O}\left(\left(\frac{a}{r}\right)\right) \\ \frac{a}{|\vec{r} - \vec{r}'|} &= \frac{a}{r} + \mathcal{O}\left(\left(\frac{a}{r}\right)^2\right) \end{aligned}$$

この積分を極座標で評価すると (\vec{r} の方向に z 軸をとって)

$$\begin{aligned} \int d^3k \frac{1}{K_\pm^2 - k^2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} &= \int_0^\infty dk k^2 \frac{1}{K_\pm^2 - k^2} (2\pi) \int_0^\pi d\theta \sin \theta e^{ikr \cos \theta} \\ &= \frac{\pi}{i} \frac{1}{r} \int_{-\infty}^\infty dk \frac{k}{K_\pm^2 - k^2} (e^{ikr} - e^{-ikr}) = \frac{\pi}{i} \frac{1}{r} 2 \int_{-\infty}^\infty dk \frac{-k}{K_\pm^2 - k^2} e^{ikr} \\ &= \frac{\pi}{i} \frac{1}{r} \int_{-\infty}^\infty dk \left(\frac{1}{k + K \pm i0} + \frac{1}{k - K \mp i0} \right) (-e^{ikr}) = \frac{\pi^2}{r} (-2) e^{\pm iKr} \end{aligned}$$

これから

$$G_0^\pm(\vec{r}) = -\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm iKr}}{r}$$

つぎに $E < 0$ の場合、一次元系の時と同様に

$$K = i\kappa = i \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}, \quad \kappa > 0$$

ととれば積分をそのまま評価でき、 $K \rightarrow K + i0$ ($E \rightarrow E + i0$) とした場合を採用すれば良く

$$G_0(\vec{r}) = -\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \frac{1}{4\pi} \frac{e^{-\kappa r}}{r}$$

となる。

³⁴

$$\begin{aligned} |\vec{r} - \vec{r}'| &= (r^2 + r'^2 - 2\vec{r} \cdot \vec{r}')^{1/2} = r \left(1 - 2\frac{\hat{r} \cdot \vec{r}'}{r} + \frac{r'^2}{r^2}\right)^{1/2} = r \left(1 - 2\frac{\hat{r} \cdot \vec{r}'}{r} + \mathcal{O}\left(\left(\frac{a}{r}\right)^2\right)\right)^{1/2} \\ &= r - \hat{r} \cdot \vec{r}' + \mathcal{O}\left(\left(\frac{a}{r}\right)\right) \end{aligned}$$

だから

$$\Psi^\pm(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{ikz} + \frac{e^{\pm ikr}}{r} \left\{ -\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \frac{(2\pi)^{3/2}}{4\pi} \int d\vec{r}' e^{\mp i\vec{k}_r \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \Psi^\pm(\vec{r}') \right\} \right] + \mathcal{O}\left(\left(\frac{a}{r}\right)\right)$$

ここで $\vec{k}_r = k\hat{r}$ は散乱方向の k ベクトルである。これは $\Psi^+(\vec{r})$ が境界条件を満たす解であることを示しており、散乱振幅は

$$f(\theta_{\vec{k}_r}) = -\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \frac{(2\pi)^{3/2}}{4\pi} \int d\vec{r}' e^{-i\vec{k}_r \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \Psi^+(\vec{r}')$$

により与えられる。ここで入射波が $\Phi_{\vec{k}_z}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{ik_z \cdot \vec{r}}$, ($\vec{k}_z = k\hat{z}$) であることに注意すると³⁵

$$\begin{aligned} f(\theta_{\vec{k}_r}) &= -\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \frac{(2\pi)^3}{4\pi} \langle \Phi_{\vec{k}_r} | V | \Psi^+ \rangle \\ &= -\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \frac{(2\pi)^3}{4\pi} \langle \Phi_{\vec{k}_r} | T | \Phi_{\vec{k}_z} \rangle \\ T &= V + V \frac{1}{E_k - H + i0} V \end{aligned}$$

と書ける。

2.3 ボルン近似

もっとも簡単な近似として積分方程式において逐次近似の最低次として右辺の Ψ^\pm に斉次解 Φ をとり

$$\Psi^\pm \approx \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{ikz} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{ik\hat{z} \cdot \vec{r}}$$

とする近似を (第一) ボルン近似という。この近似においては散乱振幅は

$$\begin{aligned} f_B(\theta_{\vec{k}}) &= -\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \frac{1}{4\pi} \int d\vec{r} e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}} V(r) \\ \vec{k}' &= k\hat{z} \end{aligned}$$

ここで

$$\vec{K} = \vec{k}' - \vec{k}$$

³⁵ $\Psi^+ = (1 + G^+V)\Phi$ であることを用いた。

として \vec{K} 方向の極座標 $(\bar{r}, \bar{\theta}, \bar{\phi})$ で計算すると³⁶

$$\begin{aligned} f_B(\theta_{\vec{k}}) &= -\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \frac{1}{4\pi} \int d\bar{\phi} \int d\bar{\theta} \sin \bar{\theta} \int d\bar{r} \bar{r}^2 e^{iK\bar{r} \cos \bar{\theta}} V(\bar{r}) \\ &= -\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \frac{1}{2} \int d\bar{r} \bar{r}^2 \frac{1}{iK\bar{r}} e^{iK\bar{r} \cos \bar{\theta}} \Big|_{\cos \bar{\theta}=-1}^{\cos \bar{\theta}=1} V(\bar{r}) \\ &= -\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \frac{1}{K} \int dr r \sin(Kr) V(r) \end{aligned}$$

微分断面積は

$$\sigma = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^2 \left| \frac{1}{K} \int_0^\infty dr V(r) r \sin(Kr) \right|^2$$

となる。

ボルン近似の例 (ラザフォード散乱)

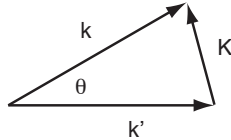
例えば湯川ポテンシャル

$$V(r) = \frac{Ae^{-\mu r}}{r}$$

の場合³⁷

$$f_B(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{A}{K^2 + \mu^2}$$

36



$$K = |\vec{K}| = \sqrt{2k^2(1 - \cos \theta)} = 2k \sin \frac{\theta}{2}$$

$$\begin{aligned} dK &= k \cos \theta / 2 d\theta \\ K dK &= k^2 \sin \theta d\theta \\ \sin \theta d\theta &= \frac{1}{k^2} K dK \end{aligned}$$

37

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dr \sin Kr r V(r) &= A \int_0^\infty dr e^{-\mu r} \sin Kr = \frac{A}{2i} \int_0^\infty dr \left(e^{(-\mu + iK)r} - e^{(-\mu - iK)r} \right) \\ &= A \frac{-1}{2i} \left(\frac{1}{-\mu + iK} - \frac{1}{-\mu - iK} \right) = \frac{AK}{K^2 + \mu^2} \end{aligned}$$

これは $\mu \rightarrow 0$, $A = -Ze^2$ とおくと

$$f_B \xrightarrow{\mu \rightarrow 0} \frac{m}{2(\hbar k)^2} \frac{Ze^2}{\sin^2 \theta/2}$$

となる。これは古典的なラザフォード散乱の公式に一致する。

2.4 部分波分解

以下しばらく、部分波分解による散乱問題を議論する。³⁸

2.4.1 球対称場中でのシュレディンガー方程式

シュレディンガー方程式

$$\begin{aligned} H\Psi(\vec{r}) &= E\Psi(\vec{r}) \\ H &= \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r) \\ \vec{p} &= \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \end{aligned}$$

の固有関数を

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}) &= R(r) \Theta(\theta) \Phi(\phi) \\ x &= r \sin \theta \cos \phi, \quad y = r \sin \theta \sin \phi, \quad z = r \cos \theta \end{aligned}$$

の形で求めることを考える。

角運動量を

$$\begin{aligned} \vec{L} &\equiv \vec{r} \times \vec{p} \\ L_i &= \epsilon_{ijk} x_j p_k, \quad x_1 = x, \quad x_2 = y, \quad x_3 = z \end{aligned}$$

とすると³⁹

$$[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k$$

³⁸球関数に関する数学的準備参照

³⁹ $[x_i, p_j] = x_i p_j - p_j x_i = i\hbar \delta_{ij}$ また

$$\begin{aligned} [L_i, L_j] &= \epsilon_{iab} \epsilon_{jcd} [x_a p_b, x_c p_d] = \epsilon_{iab} \epsilon_{jcd} (x_a [p_b, x_c p_d] + [x_a, x_c p_d] p_b) = \epsilon_{iab} \epsilon_{jcd} (x_a [p_b, x_c] p_d + x_c [x_a, p_d] p_b) \\ &= \epsilon_{iab} \epsilon_{jcd} (-i\hbar \delta_{bc} x_a p_d + i\hbar \delta_{ad} x_c p_b) = -i\hbar \epsilon_{iab} \epsilon_{jbd} x_a p_d + i\hbar \epsilon_{iab} \epsilon_{jca} x_c p_b \\ &= i\hbar (\delta_{ij} \delta_{ad} - \delta_{id} \delta_{aj}) x_a p_d - i\hbar (\delta_{ij} \delta_{bc} - \delta_{ic} \delta_{bj}) x_c p_b \\ &= i\hbar (\delta_{ij} x_a p_a - x_j p_i - \delta_{ij} x_b p_b + x_i p_j) = i\hbar (x_i p_j - x_j p_i) = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k \\ &= i\hbar \epsilon_{ijk} \epsilon_{kab} x_a p_b = i\hbar (x_i p_j - x_j p_i) \end{aligned}$$

であり、この交換関係から良く知られているように (代数的関係だけから) \vec{L}^2 と L_z の同時固有状態が次のようにとれることが一般的にわかる。

$$\begin{aligned}\vec{L}^2 Y_{\ell m} &= \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_{\ell m} \\ L_z Y_{\ell m} &= \hbar m Y_{\ell m} \\ m &= -\ell, \ell+1, \dots, \ell-1, \ell\end{aligned}$$

また⁴⁰

$$\begin{aligned}\vec{\nabla} &= \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ \vec{e}_r &= \frac{\widehat{\partial \vec{r}}}{\partial r} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta), \\ \vec{e}_\theta &= \frac{\widehat{\partial \vec{r}}}{\partial \theta} = (\cos \theta \cos \phi, \cos \theta \sin \phi, -\sin \theta), \\ \vec{e}_\phi &= \frac{\widehat{\partial \vec{r}}}{\partial \phi} = (-\sin \phi, \cos \phi, 0), \\ \vec{r} &= \vec{e}_r r\end{aligned}$$

より \vec{L} が r によらず θ, ϕ のみの関数となることがみてとれ、具体的にも次のように求まる。⁴¹

$$\begin{aligned}L_x &= -i\hbar \left(-\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ L_y &= -i\hbar \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ L_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \\ \vec{L}^2 &= -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\}\end{aligned}$$

この具体的な形をつかって \vec{L}^2 の固有値 $\hbar^2 \ell(\ell+1)$ を確定しよう。まず $Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$ として固有方程式より

$$\begin{aligned}\left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\} \Theta(\theta)\Phi(\phi) &= -\ell(\ell+1)\Theta(\theta)\Phi(\phi) \\ \frac{1}{\Theta} \sin^2 \theta \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \ell(\ell+1)\Theta \right\} &= -\frac{1}{\Phi(\phi)} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2}\end{aligned}$$

⁴⁰当然

$$\vec{r} = x\vec{e}_x + y\vec{e}_y + z\vec{e}_z$$

⁴¹

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = -i\hbar \vec{e}_\phi \frac{\partial}{\partial \theta} + i\hbar \vec{e}_\theta \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} = -i\hbar(-\sin \phi, \cos \phi, 0) \frac{\partial}{\partial \theta} + i\hbar(\cot \theta \cos \phi, \cot \theta \sin \phi, -1) \frac{\partial}{\partial \phi}$$

これを分離して

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = -m^2\Phi$$

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left\{ \ell(\ell+1) - \frac{m^2}{\sin^2\theta} \right\} \Theta = 0$$

まず最初の式より

$$\Phi(\phi) = e^{im\phi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots,$$

この m に関する条件は関数の一価性より従う。 Θ に付いての方程式から θ の全域での有界性を要求するとルジャンドルの陪関数を用いて

$$\Theta(\theta) \propto P_\ell^{|m|}(\theta), \quad \ell = 0, 1, 2, \dots, \quad m = -\ell, \ell+1, \dots, \ell$$

と書ける。⁴² これらを用いて規格化定数を次のように選ぶと

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}} P_\ell^{|m|}(\cos\theta) e^{im\phi}$$

$$\begin{aligned} L_x^2 &= -\hbar^2 (\sin\phi \partial_\theta + \cot\theta \cos\phi \partial_\phi) (\sin\phi \partial_\theta + \cot\theta \cos\phi \partial_\phi), \quad (\cot\theta)' = -\frac{1}{\sin^2\theta} \\ &= -\hbar^2 \left(\sin^2\phi \partial_\theta^2 - \frac{1}{\sin^2\theta} \sin\phi \cos\phi \partial_\phi + \cot\theta \sin\phi \cos\phi \partial_\theta \partial_\phi \right. \\ &\quad \left. + \cot\theta \cos^2\phi \partial_\theta + \cot\theta \cos\phi \sin\phi \partial_\phi \partial_\theta \right. \\ &\quad \left. - \cot^2\theta \sin\phi \cos\phi \partial_\phi + \cot^2\theta \cos^2\phi \partial_\phi^2 \right) \\ L_y^2 &= -\hbar^2 (\cos\phi \partial_\theta - \cot\theta \sin\phi \partial_\phi) (\cos\phi \partial_\theta - \cot\theta \sin\phi \partial_\phi) \\ &= -\hbar^2 \left(\cos^2\phi \partial_\theta^2 + \frac{1}{\sin^2\theta} \sin\phi \cos\phi \partial_\phi - \cot\theta \sin\phi \cos\phi \partial_\theta \partial_\phi \right. \\ &\quad \left. + \cot\theta \sin^2\phi \partial_\theta - \cot\theta \sin\phi \cos\phi \partial_\theta \partial_\phi \right. \\ &\quad \left. + \cot^2\theta \sin\phi \cos\phi \partial_\phi + \cot^2\theta \sin^2\phi \partial_\phi^2 \right) \\ L_x^2 + L_y^2 &= -\hbar^2 (\partial_\theta^2 + \cot\theta \partial_\theta + \cot^2\theta \partial_\phi^2) \\ L_z^2 &= -\hbar^2 \partial_\phi^2 \\ L^2 &= -\hbar^2 \left(\partial_\theta^2 + \cot\theta \partial_\theta + \frac{1}{\sin^2\theta} \partial_\phi^2 \right) \\ &= -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin\theta} \partial_\theta (\sin\theta \partial_\theta) + \frac{1}{\sin^2\theta} \partial_\phi^2 \right) \end{aligned}$$

⁴² $x = \cos\theta$ として $\frac{d}{d\theta} = \frac{dx}{d\theta} \frac{d}{dx} = -\sin\theta \frac{d}{dx}$ これから $\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} (\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta}) = \frac{d}{dx} (\sin^2\theta \frac{d\Theta}{dx}) = \frac{d}{dx} ((1-x^2) \frac{d\Theta}{dx})$ よって

$$\left\{ (1-x^2) \frac{d\Theta}{dx} \right\} + \left(\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right) \Theta = 0$$

(Legendre の陪微分方程式)

規格直交性

$$\langle Y_{\ell'm'} | Y_{\ell m} \rangle \equiv \int d\Omega Y_{\ell'm'}^*(\theta, \phi) Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \delta_{\ell, \ell'} \delta_{m, m'}$$

昇降演算子の作用

$$L_{\pm} Y_{\ell m} = \hbar \sqrt{(\ell \mp m)(\ell \pm m + 1)} Y_{\ell, m \pm 1}$$

複素共役

$$Y_{\ell m}^*(\theta, \phi) = (-)^m Y_{\ell, -m}(\theta, \phi)$$

が成立する。⁴³

⁴³球面調和関数 $Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \Theta_{\ell m}(\theta) \Phi_m(\phi)$ を代数関係のみから導いてみよう。まず $L_z Y_{\ell m} = m \hbar Y_{\ell m}$ より $\Phi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}$ また

$$L_+ = L_x + iL_y = \hbar e^{i\phi} (\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi)$$

$$L_- = L_x - iL_y = \hbar e^{-i\phi} (-\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi)$$

よって $L_+ Y_{\ell \ell} = 0$ から

$$\Theta'_{\ell \ell} - \ell \cot \theta \Theta_{\ell \ell} = 0, \rightarrow \Theta_{\ell \ell}(\theta) = C_\ell \sin^\ell \theta$$

規格化より

$$\begin{aligned} 1 &= |C_\ell|^2 \int_0^\pi d\theta \sin \theta \sin^{2\ell} \theta = 2|C_\ell|^2 \int_0^{\pi/2} d\theta \sin^{2\ell+1} \theta = C_\ell^2 B(\ell+1, 1) = |C_\ell|^2 \frac{\Gamma(\ell+1)\Gamma(1/2)}{\Gamma(\ell+3/2)} \\ &= |C_\ell|^2 \frac{\ell! \Gamma(1/2)}{(\ell+1/2)(\ell-1/2)(\ell-3/2) \cdots (1/2) \Gamma(1/2)} \\ &= |C_\ell|^2 \frac{\ell! 2^\ell}{(\ell+1/2)(2\ell-1)!!} = |C_\ell|^2 \frac{\ell! 2^\ell \cdot (2\ell+1) 2^{\ell} \ell!}{(\ell+1/2)(2\ell+1)!} = |C_\ell|^2 \frac{2(\ell! 2^\ell)^2}{(2\ell+1)!} \\ C_\ell &= e^{i\delta} \sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{2} \frac{1}{\ell! 2^\ell}} \end{aligned}$$

また

よって

$$\begin{aligned} Y_{\ell, m-1} &= \frac{1}{\sqrt{(\ell+m)(\ell-m+1)}} e^{-i\phi} (-\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi) Y_{\ell m} \\ &= \frac{1}{\sqrt{(\ell+m)(\ell-m+1)}} (-)(\partial_\theta + m \cot \theta) \Theta_{\ell m} \Phi_{m-1}(\phi) = \Theta_{\ell, m-1} \Phi_{m-1}(\phi) \\ \Theta_{\ell, m-1} &= - \frac{1}{\sqrt{(\ell+m)(\ell-m+1)}} (\partial_\theta + m \cot \theta) \Theta_{\ell m} \end{aligned}$$

ここで

$$\begin{aligned} \sin^{1-m} \theta \frac{d}{d \cos \theta} (\sin^m \theta \Theta) &= \sin^{1-m} \theta \left(\frac{d \cos \theta}{d\theta} \right)^{-1} \frac{d}{d\theta} (\sin^m \theta \Theta) = -\sin^{-m} \theta (\Theta m \sin^{m-1} \theta \cos \theta + \sin^m \theta \partial_\theta \Theta) \\ &= -(\Theta m \cot \theta + \partial_\theta \Theta) \end{aligned}$$

これから

$$\begin{aligned}\Theta_{\ell m-1} &= \frac{1}{\sqrt{(\ell+m)(\ell-m+1)}} \sin^{1-m} \theta \frac{d}{d \cos \theta} (\sin^m \theta \Theta_{\ell m}) \\ \Theta_{\ell m-2} &= \frac{1}{\sqrt{(\ell+m-1)(\ell-m+2)}} \sin^{2-m} \theta \frac{d}{d \cos \theta} (\sin^{m-1} \theta \Theta_{\ell m-1}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{(\ell+m)(\ell+m-1) \cdot (\ell-m+1)(\ell-m+2)}} \sin^{1-m} \theta \left(\frac{d}{d \cos \theta} \right)^2 (\sin^m \theta \Theta_{\ell m}) \\ \Theta_{\ell m-k} &= \frac{\sqrt{(\ell+m-k)!(\ell-m)!}}{\sqrt{(\ell+m)!(\ell-m+k)!}} \sin^{k-m} \theta \left(\frac{d}{d \cos \theta} \right)^k (\sin^m \theta \Theta_{\ell m})\end{aligned}$$

ここで $m \rightarrow \ell, k \rightarrow \ell - m$ として

$$\begin{aligned}\Theta_{\ell m} &= \frac{\sqrt{(\ell+m)!(0)!}}{\sqrt{(2\ell)!(\ell-m)!}} \sin^{-m} \theta \left(\frac{d}{d \cos \theta} \right)^{\ell-m} (\sin^\ell \theta \Theta_{\ell \ell}) \\ &= e^{i\delta} \sqrt{\frac{2\ell+1}{2} \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}} \frac{1}{\ell! 2^\ell} \frac{1}{\sin^m \theta} \left(\frac{d}{d \cos \theta} \right)^{\ell-m} (\sin^{2\ell} \theta)\end{aligned}$$

特に $m = 0$ として

$$\begin{aligned}\Theta_{\ell 0} &= e^{i\delta} \sqrt{\frac{2\ell+1}{2}} \frac{1}{\ell! 2^\ell} \left(\frac{d}{d(\cos \theta)} \right)^\ell (\sin^{2\ell} \theta) = e^{i\delta} (-)^\ell \sqrt{\frac{2\ell+1}{2}} \frac{1}{\ell! 2^\ell} \frac{d}{d(\cos \theta)} (\cos^2 \theta - 1)^\ell \\ &= e^{i\delta} (-)^\ell \sqrt{\frac{2\ell+1}{2}} P_\ell(\cos \theta)\end{aligned}$$

よって $e^{i\delta} = (-)^\ell$ ととって

$$\begin{aligned}\Theta_{\ell 0} &= \sqrt{\frac{2\ell+1}{2}} P_\ell(\cos \theta) \\ \Theta_{\ell m} &= (-)^\ell \sqrt{\frac{2\ell+1}{2} \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}} \frac{1}{\ell! 2^\ell} \frac{1}{\sin^m \theta} \left(\frac{d}{d \cos \theta} \right)^{\ell-m} (\sin^{2\ell} \theta)\end{aligned}$$

$m \leq 0,$

$$\begin{aligned}\Theta_{\ell m} &= \sqrt{\frac{2\ell+1}{2} \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}} \frac{1}{\ell! 2^\ell} \frac{1}{\sin^m \theta} \left(\frac{d}{d \cos \theta} \right)^{-m} P_\ell(\cos \theta) \\ &= \sqrt{\frac{2\ell+1}{2} \frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}} \sin^{|m|} \theta \left(\frac{d}{d \cos \theta} \right)^{|m|} P_\ell(\cos \theta)\end{aligned}$$

一方

$$\begin{aligned}Y_{\ell m+1} &= \frac{1}{\sqrt{(\ell-m)(\ell+m+1)}} e^{i\phi} (\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\phi) Y_{\ell m} \\ &= \frac{1}{\sqrt{(\ell-m)(\ell+m+1)}} (\partial_\theta - m \cot \theta) \Theta_{\ell m} \Phi_{\ell m+1} \\ \Theta_{\ell m+1} &= \frac{1}{\sqrt{(\ell-m)(\ell+m+1)}} (\partial_\theta - m \cot \theta) \Theta_{\ell m}\end{aligned}$$

一方、代数的関係だけから⁴⁴

$$\vec{L}^2 = r^2 \vec{p}^2 - r^2 p_r^2, \quad p_r^2 = -\hbar^2 (\partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r)$$

と書けるので

$$\frac{\vec{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m} p_r^2 + \frac{1}{2m} \frac{\vec{L}^2}{r^2}$$

$$\begin{aligned} \sin^{m+1} \theta \frac{d}{d \cos \theta} (\sin^{-m} \theta \Theta) &= \sin^{m+1} \theta \left(\frac{d \cos \theta}{d \theta} \right)^{-1} \frac{d}{d \theta} (\sin^{-m} \theta \Theta) = -\sin^m \theta (-\Theta m \sin^{-m-1} \theta \cos \theta + \sin^{-m} \theta \partial_\theta \Theta) \\ &= (\Theta m \cot \theta - \partial_\theta \Theta) \end{aligned}$$

これから

$$\begin{aligned} \Theta_{\ell m+1} &= (-) \frac{1}{\sqrt{(\ell-m)(\ell+m+1)}} \sin^{m+1} \theta \frac{d}{d \cos \theta} (\sin^{-m} \theta \Theta_{\ell m}) \\ \Theta_{\ell m+2} &= (-) \frac{1}{\sqrt{(\ell-m-1)(\ell+m+2)}} \sin^{m+2} \theta \frac{d}{d \cos \theta} (\sin^{-m-1} \theta \Theta_{\ell m+1}) \\ &= (-)^2 \frac{1}{\sqrt{(\ell-m)(\ell-m-1) \cdot (\ell+m+1)(\ell+m+2)}} \sin^{m+2} \theta \left(\frac{d}{d \cos \theta} \right)^2 (\sin^{-m} \theta \Theta_{\ell m}) \\ \Theta_{\ell m+k} &= (-)^k \frac{\sqrt{(\ell-m-k)!(\ell+m)!}}{\sqrt{(\ell-m)!(\ell+m+k)!}} \sin^{m+k} \theta \left(\frac{d}{d \cos \theta} \right)^k (\sin^{-m} \theta \Theta_{\ell m}) \\ & \quad m \rightarrow 0, k \rightarrow m \text{ として } (m > 0) \\ \Theta_{\ell m} &= (-)^m \frac{\sqrt{(\ell-m)! \ell!}}{\sqrt{\ell! (\ell+m)!}} \sin^m \theta \left(\frac{d}{d \cos \theta} \right)^m \Theta_{\ell 0} \\ &= (-)^m \sqrt{\frac{2\ell+1}{2} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} \sin^m \theta \left(\frac{d}{d \cos \theta} \right)^m P_\ell(\cos \theta) \end{aligned}$$

また $P_\ell^{|\ell|}(\cos \theta) = \sin^{|\ell|} \theta \left(\frac{d}{d \cos \theta} \right)^{|\ell|} P_\ell(\cos \theta)$ より

$$\Theta_{\ell m} = (-1)^{\frac{m+|\ell|}{2}} \sqrt{\frac{2\ell+1}{2} \frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}} P_\ell^{|\ell|}(\cos \theta)$$

また $m \leq 0$ とあわせて $\Theta_{\ell-m} = (-)^m \Theta_{\ell m}$

⁴⁴ $\vec{r} \cdot \vec{p} = -i\hbar x_i \partial_i = -i\hbar r \frac{x_i}{r} \partial_i = -i\hbar r \frac{\partial x_i}{\partial r} \partial_i = -i\hbar r \partial_r$ であり、

$$\begin{aligned} \vec{L}^2 &= \epsilon_{ijk} \epsilon_{ilm} x_j p_k x_l p_m = (\delta_{jl} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{kl}) x_j p_k x_l p_m \\ &= x_j p_k x_j p_k - x_j p_l x_l p_j = x_j (x_j p_k - i\hbar \delta_{jk}) p_k - x_j (x_l p_l - i\hbar \delta_{ll}) p_j \\ &= r^2 \vec{p}^2 - i\hbar \vec{r} \cdot \vec{p} - x_j (p_j x_l + i\hbar \delta_{lj}) p_l + 3i\hbar \vec{r} \cdot \vec{p} = r^2 \vec{p}^2 - (\vec{r} \cdot \vec{p})^2 + i\hbar \vec{r} \cdot \vec{p} \\ &= r^2 \vec{p}^2 - r^2 p_r^2 \\ p_r^2 &= \frac{1}{r^2} \left\{ (\vec{r} \cdot \vec{p})^2 - i\hbar \vec{r} \cdot \vec{p} \right\} = \frac{\hbar^2}{r^2} \left\{ -r \partial_r r \partial_r - r \partial_r \right\} = -\hbar^2 (\partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r) \end{aligned}$$

ここで $\Psi(\vec{r}) = R(r)Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ とするとシュレディンガー方程式から

$$\left\{ - \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + U(r) \right\} R_{\ell}(r) = k^2 R_{\ell}(r)$$

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E, \quad \frac{\hbar^2}{2m} U(r) = V(r)$$

となる。特にポテンシャルが定数 $V = V_0$ の場合 $x = kr$, $E - V_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ とおいて

$$\left\{ \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{d}{dx} \right) + 1 - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} \right\} F_{\ell}(x) = 0$$

この方程式を球ベッセル方程式という。2階の微分方程式は独立な2つの解を持ち⁴⁵ この解を用いてシュレディンガー方程式の一般解は

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{\ell m} c_{\ell m} R_{\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi), \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

と書ける。

この動径部分の波動関数 R_{ℓ} に対する要求をここでまとめてみよう。

- 原点近傍での振舞

$V(r)$ が原点付近で特異性をもたないとき⁴⁶

$$R_{\ell}(kr) \xrightarrow{\vec{r} \rightarrow 0} (kr)^{\ell}$$

- 保存量

⁴⁵独立な解として球ベッセル関数 $j_{\ell}(x)$ と球ノイマン関数 $n_{\ell}(x)$ の組または、第一種ハンケル関数 $h_{\ell}^{(1)}(x)$ と第二種ハンケル関数 $h_{\ell}^{(2)}(x)$ の組が用いられる。

$$F_{\ell}(x) = A_{\ell} j_{\ell}(x) + B_{\ell} n_{\ell}(x) = C_{\ell} h_{\ell}^{(1)}(x) + D_{\ell} h_{\ell}^{(2)}(x)$$

なおこれらは

$$j_{\ell}(x) = (-x)^{\ell} \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^{\ell} \left(\frac{\sin x}{x} \right) \xrightarrow{x \rightarrow 0} \frac{x^{\ell}}{(2\ell+1)!!}$$

$$n_{\ell}(x) = -(-x)^{\ell} \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^{\ell} \left(\frac{\cos x}{x} \right) \xrightarrow{x \rightarrow 0} -\frac{(2\ell-1)!!}{x^{\ell+1}}$$

と具体的に与えられる。

⁴⁶原点付近で $R_{\ell} \sim r^n$ とするとシュレディンガー方程式より $\{-n(n-1) - 2n + \ell(\ell+1)\} r^{n-2} \sim 0$ これから

$$-n^2 - n + \ell^2 + \ell = (\ell - n)(\ell + n + 1) = 0$$

よって r^{ℓ} , $\frac{1}{r^{\ell+1}}$ となるが原点で確率振幅が発散しないことを要求する。

特にポテンシャルが実の場合⁴⁷

$$\det \begin{pmatrix} rR_\ell & rR_\ell^* \\ (rR_\ell)' & (rR_\ell^*)' \end{pmatrix} = 0$$

は座標によらない保存量となる。($r \rightarrow 0$ を考える)

2.4.2 位相のずれ

ポテンシャルが有限の領域に限られている場合を考えよう。この場合ポテンシャルが無い領域では自由粒子であり波動関数は⁴⁸

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{\ell} A_{\ell} \{ S_{\ell} h_{\ell}^{(1)}(kr) + h_{\ell}^{(2)}(kr) \} P_{\ell}(\cos \theta)$$

と書ける。まず無限遠での漸近条件を考え各部分波の振幅 A_{ℓ} を定めると⁴⁹

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{(2\ell+1)}{2} i^{\ell} \{ S_{\ell} h_{\ell}^{(1)}(kr) + h_{\ell}^{(2)}(kr) \} P_{\ell}(\cos \theta) \\ &\rightarrow \sum_{\ell} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{-i(2\ell+1)}{2} \frac{1}{kr} \{ S_{\ell} e^{ikr} - (-1)^{\ell} e^{-ikr} \} P_{\ell}(\cos \theta) \end{aligned}$$

⁴⁷ $R(x) = x^n \mathcal{R}(x)$ とすると $R' = nx^{n-1} \mathcal{R} + x^n \mathcal{R}'$, $R'' = n(n-1)x^{n-2} \mathcal{R} + 2nx^{n-1} \mathcal{R}' + x^n \mathcal{R}''$ よって

$$R'' + 2x^{-1} R' = n(n-1)x^{n-2} \mathcal{R} + 2nx^{n-1} \mathcal{R}' + x^n \mathcal{R}'' + 2nx^{n-2} \mathcal{R} + 2x^{n-1} \mathcal{R}' = x^n \mathcal{R}'' + 2(1+n)x^{n-1} \mathcal{R}' + \dots$$

よって $R(x) = x^{-1} \mathcal{R}(x)$ とすると \mathcal{R} についての微分方程式には1階の微分がなく $\mathcal{R}_1, \mathcal{R}_2$ が解である場合そのロンスキー行列は不変となる。特にポテンシャルが実の場合 R と R^* のロンスキー行列式を考えると

$$\det \begin{pmatrix} rR & rR^* \\ (rR)' & (rR^*)' \end{pmatrix}$$

は座標によらない。

⁴⁸ 角度 ϕ をどこから計るかは自由だから波動関数は ϕ によらない。よって $Y_{\ell m=0}$ のみ寄与する。

⁴⁹ 引数の大きい場合の漸近形は

$$\begin{aligned} j_{\ell}(x) &\xrightarrow{x \rightarrow \infty} \frac{1}{x} \sin \left(x - \frac{\ell\pi}{2} \right), & n_{\ell}(x) &\xrightarrow{x \rightarrow \infty} -\frac{1}{x} \cos \left(x - \frac{\ell\pi}{2} \right) \\ h_{\ell}^{(1)}(x) &\xrightarrow{x \rightarrow \infty} (-i)^{\ell+1} \frac{e^{ix}}{x} & h_{\ell}^{(2)}(x) &\xrightarrow{x \rightarrow \infty} (i)^{\ell+1} \frac{e^{-ix}}{x} \end{aligned}$$

より

$$\Psi(\vec{r}) \rightarrow \sum_{\ell} A_{\ell} \frac{(-i)^{\ell+1}}{kr} \{ S_{\ell} e^{ikr} - (-1)^{\ell} e^{-ikr} \} P_{\ell}(\cos \theta)$$

ここで散乱振幅を完全系で $f(\theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} a_{\ell} P_{\ell}(\cos \theta)$ と展開し、更に入射波を次のように部分波に展開する。

$$\begin{aligned} e^{ikr \cos \theta} &= \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^{\ell} j_{\ell}(kr) P_{\ell}(\cos \theta) \\ j_{\ell}(x) &\xrightarrow{x \rightarrow \infty} \frac{1}{x} \sin \left(x - \frac{\ell\pi}{2} \right) = \frac{1}{2ix} (e^{ix - i\frac{\ell\pi}{2}} - e^{-ix + i\frac{\ell\pi}{2}}) = \frac{1}{2ix} ((-i)^{\ell} e^{ix} - i^{\ell} e^{-ix}) \end{aligned}$$

また散乱振幅も S_ℓ をつかって

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1)(S_\ell - 1)P_\ell(\cos\theta)$$

と書けることがわかる。ここでの未定の係数 S_ℓ は散乱行列と呼ばれポテンシャルのある領域との境界条件から定まるがここではしばらく求めたものと考えて議論を進めよう。

ここで各 ℓ 部分波についての動径部分に対する以前に議論した保存則を適用すると粒子数の保存則に対応して⁵⁰

$$|S_\ell| = 1$$

が得られる。よって

$$S_\ell = e^{i2\delta_\ell}, \quad \delta: \text{real}$$

これを用いて無限遠での境界条件を部分波に展開すると以下ようになる。

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left(e^{ikr \cos\theta} + \frac{f(\theta)}{r} e^{ikr} \right) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{2ikr} \sum_{\ell=0}^{\infty} \left\{ (2\ell+1) i^\ell \left((-i)^\ell e^{ikr} - i^\ell e^{-ikr} \right) + 2ika_\ell e^{ikr} \right\} P_\ell(\cos\theta) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{2ikr} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \left\{ \left(1 + \frac{2ika_\ell}{2\ell+1} \right) e^{ikr} - (-)^\ell e^{-ikr} \right\} P_\ell(\cos\theta) \end{aligned}$$

これらを比較して

$$\begin{aligned} a_\ell &= \frac{(2\ell+1)}{2ik} (S_\ell - 1) \\ A_\ell \frac{(-i)^{\ell+1}}{kr} &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{(2\ell+1)}{2ikr} \end{aligned}$$

より

$$A_\ell = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{(2\ell+1)}{2} i^\ell$$

50

$$\begin{aligned} 0 &= \det \begin{pmatrix} S_\ell e^{ikr} - (-1)^\ell e^{-ikr} & S_\ell^* e^{-ikr} - (-1)^\ell e^{ikr} \\ ikS_\ell e^{ikr} + ik(-1)^\ell e^{-ikr} & -ikS_\ell^* e^{-ikr} - ik(-1)^\ell e^{ikr} \end{pmatrix} \\ &= \det \begin{pmatrix} S_\ell e^{ikr} - (-1)^\ell e^{-ikr} & S_\ell^* e^{-ikr} - (-1)^\ell e^{ikr} \\ 2ik(-1)^\ell e^{-ikr} & -2ikS_\ell^* e^{-ikr} \end{pmatrix} \\ &= \det \begin{pmatrix} S_\ell e^{ikr} - (-1)^\ell e^{-ikr} & \{|S_\ell|^2 - 1\}(-1)^\ell e^{ikr} \\ 2ik(-1)^\ell e^{-ikr} & 0 \end{pmatrix} = -2ik\{|S_\ell|^2 - 1\} \end{aligned}$$

として漸近形を書き直すと⁵¹

$$\Psi(\vec{r}) \longrightarrow \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\ell} \frac{(2\ell+1)}{kr} i^{\ell} e^{i\delta_{\ell}} \sin(kr - \frac{\pi}{2}\ell + \delta_{\ell}) P_{\ell}(\cos\theta)$$

これをポテンシャルの無い場合の漸近形

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{ikr \cos\theta} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{(2\ell+1)}{kr} i^{\ell} \sin(kr - \frac{\pi}{2}\ell) P_{\ell}(\cos\theta)$$

と比べると位相が δ_{ℓ} だけずれていることがわかり、 δ_{ℓ} を位相のずれと呼ぶ。
また全散乱断面積は⁵²

$$\sigma_T = \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(0) = \sum_{\ell} \frac{4\pi}{k^2} (2\ell+1) \sin^2 \delta_{\ell}$$

を満たす。この第一式を光学定理という。これから $\delta_{\ell} = (n + \frac{1}{2})\pi$, n : (整数) の時 ℓ 波の散乱断面積が最大となり、 $\delta_{\ell} = n\pi$ のときに 0 となることがわかる。

2.4.3 対数微分と位相のずれ

具体的に位相のずれを決める際、半径 $r = a$ 内での波動関数と外での動径部分の波動関数の接続条件を各部分波ごとに考えよう。

$$\begin{aligned} R_{\ell}^{in}(a) &= R_{\ell}^{out}(a) \\ R_{\ell}^{in'}(a) &= R_{\ell}^{out'}(a) \end{aligned}$$

51

$$\begin{aligned} e^{i(2\delta_{\ell}+kr)} - e^{i(\pi\ell-kr)} &= e^{i(\delta_{\ell}+\frac{\pi}{2}\ell)} (e^{i(\delta_{\ell}+kr-\frac{\pi}{2}\ell)} - e^{i(-\delta_{\ell}+\frac{\pi}{2}\ell-kr)}) \\ &= e^{i(\delta_{\ell}+\frac{\pi}{2}\ell)} 2i \sin(kr - \frac{\pi}{2}\ell + \delta_{\ell}) \end{aligned}$$

52

$$\begin{aligned} \sigma_T &= \int d\Omega |f(\theta)|^2 = \frac{1}{4k^2} \sum_{\ell} (2\ell+1)^2 |S_{\ell} - 1|^2 2\pi \frac{2}{(2\ell+1)} \\ &= \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell} (2\ell+1) |S_{\ell} - 1|^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Im} f(0) &= \frac{f(0) - f^*(0)}{2i} = \frac{1}{2i} \frac{1}{2ik} \sum_{\ell} (2\ell+1) (S_{\ell} + S_{\ell}^* - 2) P_{\ell}(\cos\theta) \\ &= -\frac{1}{4k} \sum_{\ell} (2\ell+1) (-1)(1 - S_{\ell})(1 - S_{\ell}^*) = \frac{1}{4k} \sum_{\ell} (2\ell+1) |1 - S_{\ell}|^2 = \frac{1}{4k} 4 \sum_{\ell} (2\ell+1) \sin^2 \delta_{\ell} \end{aligned}$$

ここで外部での波動関数は

$$R_\ell^{out}(r) = C(S_\ell h_\ell^{(1)}(kr) + h_\ell^{(2)}(kr))$$

と書け規格化因子 C は不明だからここで得られる条件は

$$\left. \frac{d \log R_\ell^{in}(r)}{dr} \right|_{r=a} = \left. \frac{d \log R_\ell^{out}(r)}{dr} \right|_{r=a} = k \frac{S_\ell h_\ell^{(1)'}(ka) + h_\ell^{(2)'}(ka)}{S_\ell h_\ell^{(1)}(ka) + h_\ell^{(2)}(ka)}$$

ここで

$$h^{(1,2)'}(ka) = \left. \frac{dh^{(1,2)}(x)}{dx} \right|_{x=ka}$$

よって内部のポテンシャルの影響を

$$f_\ell^{in} = \frac{1}{k} \left. \frac{d \log R_\ell^{in}(r)}{dr} \right|_{r=a}$$

としてパラメトライズすると

$$S_\ell = - \frac{h_\ell^{(2)}(ka) f_\ell^{in} - h_\ell^{(2)'}(ka)}{h_\ell^{(1)}(ka) f_\ell^{in} - h_\ell^{(1)'}(ka)}$$

また⁵³

$$\tan \delta_\ell = \frac{j_\ell(ka) f_\ell^{in} - j_\ell'(ka)}{n_\ell(ka) f_\ell^{in} - n_\ell'(ka)}$$

すなわち外部における波動関数は散乱領域の境界における対数微分のみで定まり、ポテンシャルの細部にはよらない。

低エネルギー散乱

低エネルギー散乱の場合

$$ka \ll 1$$

53

$$\tan \delta_\ell = \frac{1}{i} \frac{S_\ell - S_\ell^*}{S_\ell + S_\ell^* + 2}$$

であり、^{54 55}

$$\delta_\ell \propto \begin{cases} (ka)^2 & \ell = 0 \\ (ka)^{2\ell+1} & \ell \geq 1 \end{cases}$$

よって⁵⁶

$$f(\theta) = \frac{\delta_0}{k}$$

剛体球の場合

半径 $r = a$ の剛体球がある場合、 $r = a$ で $R(a) = 0$ と考えられるので

$$f_\ell^{in} = \infty$$

これより、

$$\tan \delta_\ell = \frac{j_\ell(ka)}{n_\ell(ka)}$$

特に低エネルギーの場合 $ka \ll 1$ として漸近形をもちいて⁵⁷

$$\tan \delta_\ell = -\frac{(ka)^{2\ell+1}}{(2\ell+1)!!(2\ell-1)!!}$$

となる。

54

$$\begin{aligned} \tan \delta_\ell &\rightarrow -\frac{1}{(2\ell+1)!!(2\ell-1)!!} (ka)^{2\ell+1} \frac{f_\ell^{in} - \ell/(ka)}{f_\ell^{in} + (\ell+1)/(ka)} \\ &= -\frac{1}{(2\ell+1)!!(2\ell-1)!!} \frac{ka f_\ell^{in} - \ell}{ka f_\ell^{in} + \ell + 1} (ka)^{2\ell+1} \\ &\propto \begin{cases} (ka)^2 & \ell = 0 \\ (ka)^{2\ell+1} & \ell \geq 1 \end{cases} \end{aligned}$$

⁵⁵剛体球の場合少し異なる。

56

$$\begin{aligned} f(\theta) &= \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1)(S_\ell - 1)P_\ell(\cos \theta) \\ &\rightarrow \frac{1}{2ik} 2i\delta_0 = \frac{\delta_0}{k} \end{aligned}$$

57

$$\begin{aligned} j_\ell(x) &\xrightarrow{x \rightarrow 0} \frac{x^\ell}{(2\ell+1)!!} \\ n_\ell(x) &\xrightarrow{x \rightarrow 0} -\frac{(2\ell-1)!!}{x^{\ell+1}} \end{aligned}$$

2.4.4 Jost 関数と束縛状態

動径部分の部分波の方程式を

$$\mathcal{R}(r) = rR(r)$$

について書くと前述のように、

$$\mathcal{R}'' - \left(U(r) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) \mathcal{R} = -k^2 \mathcal{R}$$

となる。この方程式には1次の微分項がないためそのロンスキー行列式は保存量となる。ここで3つの異なる境界条件を満たす解を考えよう。

- 物理的な解

原点での正則性を要求し規格化を

$$\mathcal{R} = \psi^\ell(k, r) \rightarrow r^{\ell+1} \quad (r \rightarrow 0)$$

とする。規格化を除きこれがいままで議論してきた解である。

- Jost の解

$$\mathcal{R} = f_\pm^\ell(k, r) \rightarrow e^{\pm ikr} \quad (k > 0, \quad r \rightarrow \infty)$$

ここでこれらの解の間の Wronskian を計算しておくると全て保存量であり、座標に依存せず、⁵⁸

$$W(f_+^\ell(k, r), f_-^\ell(k, r)) = -2ik$$

そこで

$$W(f_\pm^\ell(k, r), \psi^\ell(k, r)) = f_\pm^\ell(k)$$

とおき

$$f_\pm^\ell(k)$$

を Jost 関数という。

さらに方程式が2階であるから物理的な解は Jost の解でかけてその係数は Jost 関数で以下のように与えられる。

$$\psi^\ell(k, r) = \frac{-i}{2k} \{ f_-^\ell(k) f_+^\ell(k, r) - f_+^\ell(k) f_-^\ell(k, r) \}$$

58

$$W(f_+^\ell(k, r), f_-^\ell(k, r)) = \det \begin{pmatrix} f_+ & f_- \\ f_+' & f_- ' \end{pmatrix} = \det \begin{pmatrix} e^{ikr} & e^{-ikr} \\ ike^{ikr} & -ike^{-ikr} \end{pmatrix} = \det \begin{pmatrix} e^{ikr} & e^{-ikr} \\ 2ike^{ikr} & 0 \end{pmatrix} = -2ik$$

また物理的な解の漸近形を考えて散乱行列の定義と比較すると⁵⁹

$$f_{\pm}^{\ell}(k) = (\pm)^{\ell} f^{\ell}(k) e^{\mp i\delta_{\ell}(k)}$$

とかける。なお

$$S_{\ell} = (-1)^{\ell} \frac{f_{-}^{\ell}}{f_{+}^{\ell}}$$

となる。

特に 波数 k を複素数まで解析接続した場合、実のエネルギーで

$$k = i\kappa, \quad \kappa > 0$$

の時物理的な解が

$$\psi(i\kappa, r) \rightarrow f_{-}^{\ell}(i\kappa)e^{-\kappa r} - f_{+}^{\ell}(i\kappa)e^{\kappa r}$$

となるので

$$f_{+}^{\ell}(k = i\kappa) = 0$$

であれば全空間で規格化可能な解となり、束縛状態をあらわす。また上式より、この束縛状態のエネルギーで散乱行列は極を持つことになる。

$$\frac{1}{S(k = i\kappa)} = 0$$

またポテンシャルが実であることより以下の対称性が従う。

- $\psi^{\ell}(k, r) = \psi^{\ell}(-k, r) = \psi^{\ell*}(k, r)$
- $f_{+}^{\ell}(k, r) = f_{-}^{\ell}(-k, r)$ よって $f_{+}^{\ell}(k) = f_{-}^{\ell}(-k)$
- $f_{+}^{\ell*}(k, r) = f_{-}^{\ell}(k, r)$ よって $f_{+}^{\ell*}(k) = f_{-}^{\ell}(k)$

これら Jost 関数ならびに位相のずれを複素平面に解析接続する議論を進めると 位相のずれの解析から束縛状態の個数がきまる ことがわかる。これを Levinson の定理とよぶ。

59

$$\psi^{\ell}(k, r) = \frac{-if_{+}^{\ell}(k)}{2k} \left(\frac{f_{-}^{\ell}}{f_{+}^{\ell}} e^{ikr} - e^{-ikr} \right) \quad (r \rightarrow \infty)$$

散乱行列の定義から

$$S_{\ell} = (-1)^{\ell} \frac{f_{-}^{\ell}}{f_{+}^{\ell}}$$

よって

$$f_{\pm}^{\ell}(k) = (\pm i)^{\ell} f^{\ell}(k) e^{\mp i\delta_{\ell}(k)}$$

3次元井戸型ポテンシャルの場合の S 波散乱

波動関数 $\mathcal{R} = rR$ の満たすべき方程式, 特に S 波 $\ell = 0$ の場合を考えよう。

$$\mathcal{R}'' + (k^2 - U(r))\mathcal{R} = 0$$

井戸型ポテンシャルの場合

$$U(x) = \begin{cases} U_0 & r \leq a \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

と仮定して

$$K^2 = k^2 - U_0$$

とにおいて⁶⁰

$$f_0^{in} = \frac{1}{ka}(Ka \cot Ka - 1)$$

これから⁶¹

$$\tan \delta_0 = \frac{ka \cot ka - Ka \cot Ka}{ka + Ka \cot Ka \cot ka}$$

⁶⁰境界条件

$$\mathcal{R}|_{r=0} = rR|_{r=0} = 0$$

を要求して

$$\begin{aligned} \mathcal{R} &= C \sin Kr \\ \frac{d \log R}{dr} &= \frac{d \log(r^{-1} \mathcal{R})}{r} = -\frac{1}{r} + K \frac{\cos Kr}{\sin Kr} \\ f_0^{in} &= \frac{1}{k} \frac{d \log R}{dr} \Big|_{r=a} = \frac{1}{ka} (Ka \cot Ka - 1) \end{aligned}$$

⁶¹

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}, \quad j_0'(x) = \frac{x \cos x - \sin x}{x^2}, \quad n_0(x) = -\frac{\cos x}{x}, \quad n_0'(x) = \frac{x \sin x + \cos x}{x^2},$$

より $x = ka$ として

$$\begin{aligned} \tan \delta_0 &= \frac{j_0(x)f_0^{in} - j_0'(x)}{n_0(x)f_0^{in} - n_0'(x)} = \frac{\frac{\sin x}{x} \frac{1}{x} (Ka \cot Ka - 1) - \frac{x \cos x - \sin x}{x^2}}{-\frac{\cos x}{x} \frac{1}{x} (Ka \cot Ka - 1) - \frac{x \sin x + \cos x}{x^2}} \\ &= \frac{\sin x Ka \cot Ka - x \cos x}{-\cos x Ka \cot Ka - x \sin x} = \frac{ka \cot ka - Ka \cot Ka}{ka + Ka \cot Ka \cot ka} \end{aligned}$$

よって低エネルギー $ka \ll 1$ においては⁶²

$$\tan \delta_0 = ka \frac{1 - a\sqrt{-U_0} \cot a\sqrt{-U_0}}{a\sqrt{-U_0} \cot a\sqrt{-U_0}}$$

剛体球の場合 $U_0 \rightarrow \infty$ で

$$\tan \delta_0 = -ka$$

と前の結果と一致し、一般にポテンシャルが弱いければ $a\sqrt{-U_0}$ について展開し、⁶³

$$\tan \delta_0 \rightarrow -\frac{U_0 ka^3}{3} \approx \delta_0$$

つまり引力なら $\delta_0 > 0$ 斥力なら $\delta_0 < 0$ となる。

更に束縛状態に関してはこの節で議論している積分方程式の方法をもちいて束縛状態を議論するには $E < 0$ でありかつ $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ で定まる k を $k \rightarrow i\kappa$, ($\kappa > 0$) とすることを思い出すと

$$\mathcal{R} \approx S_\ell h^{(1)}(kr) + h^{(2)}(kr) = S_\ell h_0^{(1)}(i\kappa r) + h_0^{(2)}(i\kappa r)$$

$$h_0^{(1)}(i\kappa r) = j_0(i\kappa r) + in_0(i\kappa r) = \frac{e^{-\kappa r}}{i\kappa r}, \quad h_0^{(2)}(i\kappa r) = j_0(i\kappa r) - in_0(i\kappa r) = \frac{e^{\kappa r}}{i\kappa r},$$

より規格化していない波動関数に関して

$$S_\ell \rightarrow \infty$$

が必要なことがわかる。つまり、束縛状態のエネルギーは確かに散乱行列の極をあたえることが確認できた。具体的には今の場合⁶⁴

$$\tan \delta_0 + i = 0$$

から定まる。

⁶²

$$\begin{aligned} Ka &\xrightarrow{ka \rightarrow 0} a\sqrt{-U_0} \\ \tan \delta_0 &\xrightarrow{ka \rightarrow 0} ka \frac{1 - a\sqrt{-U_0} \cot a\sqrt{-U_0}}{a\sqrt{-U_0} \cot a\sqrt{-U_0}} \end{aligned}$$

⁶³

$$\cot x = \frac{1}{x} - \frac{1}{3}x \cdots$$

より

$$\tan \delta_0 \rightarrow ka \frac{1}{3} (a\sqrt{-U_0})^2 = -\frac{U_0 ka^3}{3}$$

⁶⁴

$$S_0 = \frac{e^{i\delta_0}}{e^{-i\delta_0}} = \frac{\cot \delta_0 + i}{\cot \delta_0 - i}$$

3 時間依存の散乱理論

3.1 リップマン–シュインガー方程式

ここでは時間に依存する形での散乱理論を議論し定常状態での議論との関係を理解したい。まずシュレディンガー方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle_S = H |\Psi(t)\rangle_S$$

$$H = H_0 + V$$

ここで $V = 0$ のときの形式解に注意して

$$|\Psi(t)\rangle_S = e^{-iH_0 t/\hbar} |\Psi(t)\rangle$$

とすれば ($|\Psi(t)\rangle$ を相互作用表示と呼ぶ。) ⁶⁵

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = V(t) |\Psi(t)\rangle$$

$$V(t) = e^{iH_0 t/\hbar} V e^{-iH_0 t/\hbar}$$

これから

$$|\Psi(t)\rangle = U_+(t) |\Psi(-\infty)\rangle$$

として⁶⁶

$$U_+(t) = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t d\tau V(\tau) U_+(\tau)$$

65

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle_S = H_0 e^{-iH_0 t/\hbar} |\Psi(t)\rangle + e^{-iH_0 t/\hbar} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = (H_0 + V) e^{-iH_0 t/\hbar} |\Psi(t)\rangle$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = e^{iH_0 t/\hbar} V e^{-iH_0 t/\hbar} |\Psi(t)\rangle$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = V(t) |\Psi(t)\rangle$$

$$V(t) = e^{iH_0 t/\hbar} V e^{-iH_0 t/\hbar}$$

66

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_+(t) = V(t) U_+(t)$$

$$U_+(-\infty) = 1$$

積分形では

$$U_+(t) = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t d\tau V(\tau) U_+(\tau)$$

特に

$$|\Psi(+\infty)\rangle = S|\Psi(-\infty)\rangle$$

として $S = U_+(+\infty)$.

$$S = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau V(\tau)U_+(\tau)$$

ここで時間 $t \rightarrow \pm\infty$ において相互作用が断熱的に消え $H \rightarrow H_0$ となるような状況を考える。そのために

$$V(t) \rightarrow V(t)e^{-0|t|/\hbar} = V^\epsilon(t)$$

としよう。この仮定の下で、初期状態として特に H_0 の固有状態 $|\Phi_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}}e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}}$ をとれば^{67 68}

$$\begin{aligned} |\Psi(-\infty)\rangle &= |\Phi_i\rangle \\ H_0|\Phi_i\rangle &= E_i|\Phi_i\rangle \\ \langle\Phi_i|\Phi_j\rangle &= 1_{ij} = \delta(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \end{aligned}$$

$t: -\infty \rightarrow +\infty$ における遷移確率 W_{ji} として

$$W_{ji} = |\langle\Phi_j|S\Phi_i\rangle|^2 = |S_{ji}|^2$$

となる。ここで

$$T = S - 1$$

とすれば

$$\begin{aligned} i \neq j, \quad W_{ji} &= |T_{ji}|^2 \\ T_{ji} &= \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \langle\Phi_j|V^\epsilon(\tau)U_+(\tau)|\Phi_i\rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{iE_j\tau/\hbar} \langle\Phi_j|V e^{-iH_0\tau/\hbar} e^{-0|\tau|/\hbar} U_+(\tau)|\Phi_i\rangle \end{aligned}$$

⁶⁷ $V = 0$ の場合相互作用表示の波動関数は定常状態の波動関数となる。

⁶⁸

$$\langle\Phi_i|\Phi_j\rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{r} e^{-i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \cdot \mathbf{r}} = 1_{ij} = \delta(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j)$$

よって

$$|\Psi_i^{(+)}(E)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(E-H_0)\tau/\hbar} e^{-i|\tau|/\hbar} U_+(\tau) |\Phi_i\rangle$$

として

$$T_{ji} = \frac{1}{i\hbar} \langle \Phi_j | V | \Psi_i^{(+)}(E_j) \rangle$$

U_+ の積分方程式より^{69 70}

$$\begin{aligned}
|\Psi_i^{(+)}(E)\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(E-H_0)\tau/\hbar} e^{-0|\tau|/\hbar} |\Phi_i\rangle \\
&\quad + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(E-H_0)\tau/\hbar} e^{-0|\tau|/\hbar} \left(\int_{-\infty}^{\tau} d\tau' V^\epsilon(\tau') U_+^\epsilon(\tau') \right) |\Phi_i\rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(E-H_0)\tau/\hbar} e^{-0|\tau|/\hbar} |\Phi_i\rangle \\
&\quad + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau' \int_{\tau'}^{\infty} d\tau e^{i(E-H_0)\tau/\hbar} e^{-0|\tau|/\hbar} V^\epsilon(\tau') U_+^\epsilon(\tau') |\Phi_i\rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(E-H_0)\tau/\hbar} e^{-0|\tau|/\hbar} |\Phi_i\rangle \\
&\quad + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau' \int_{\tau'}^{\infty} d\tau e^{i(E-H_0)\tau/\hbar} e^{-0|\tau|/\hbar} e^{-0|\tau'|/\hbar} e^{iH_0\tau'/\hbar} V e^{-iH_0\tau'/\hbar} U_+^\epsilon(\tau') |\Phi_i\rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(E-H_0)\tau/\hbar} e^{-0|\tau|/\hbar} |\Phi_i\rangle \\
&\quad + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau' e^{-0|\tau'|/\hbar} \int_{\tau'}^{\infty} d\tau e^{-0|\tau|/\hbar} e^{i(E-H_0)\tau/\hbar} e^{iH_0\tau'/\hbar} V e^{-iH_0\tau'/\hbar} U_+^\epsilon(\tau') |\Phi_i\rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(E-H_0)\tau/\hbar} e^{-0|\tau|/\hbar} |\Phi_i\rangle \\
&\quad + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau' e^{-0|\tau'|/\hbar} \int_{\tau'}^{\infty} d\tau e^{-0|\tau|/\hbar} e^{i(E-H_0)(\tau-\tau')/\hbar} V e^{i(E-H_0)\tau'/\hbar} U_+^\epsilon(\tau') |\Phi_i\rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(E-H_0)\tau/\hbar} e^{-0|\tau|/\hbar} |\Phi_i\rangle \\
&\quad + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau' e^{-0|\tau'|/\hbar} \int_0^{\infty} d\tau e^{-0|\tau|/\hbar} e^{i(E-H_0)\tau/\hbar} V e^{i(E-H_0)\tau'/\hbar} U_+^\epsilon(\tau') |\Phi_i\rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(E-H_0)\tau/\hbar} e^{-0|\tau|/\hbar} |\Phi_i\rangle \\
&\quad + \frac{1}{i\hbar} \int_0^{\infty} d\tau e^{-0|\tau|/\hbar} e^{i(E-H_0)\tau/\hbar} V \int_{-\infty}^{\infty} d\tau' e^{-0|\tau'|/\hbar} e^{i(E-H_0)\tau'/\hbar} U_+^\epsilon(\tau') |\Phi_i\rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(E-H_0)\tau/\hbar} e^{-0|\tau|/\hbar} |\Phi_i\rangle \\
&\quad + \frac{1}{i\hbar} \int_0^{\infty} d\tau e^{-0\tau/\hbar} e^{i(E-H_0)\tau/\hbar} V |\Psi_i^{(+)}(E)\rangle
\end{aligned}$$

⁷⁰デルタ関数の定義に注意

$$\begin{aligned}
\frac{1}{x \pm i0} &= P \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x) \\
\delta(x) &= -\frac{1}{2\pi i} \left(\frac{1}{x+i0} - \frac{1}{x-i0} \right) = \frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{x-i0}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
|\Psi_i^{(+)}(E)\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(E-E_i)\tau/\hbar} e^{-0|\tau|/\hbar} |\Phi_i\rangle \\
&\quad + \frac{1}{i\hbar} \int_0^{\infty} d\tau e^{-0\tau/\hbar} e^{i(E-H_0)\tau/\hbar} V |\Psi_i^{(+)}(E)\rangle \\
&= 2\pi\hbar\delta(E-E_i) |\Phi_i\rangle + \frac{1}{E+i0-H_0} V |\Psi_i^{(+)}(E)\rangle
\end{aligned}$$

そこで

$$|\Psi_i^{(+)}(E)\rangle = 2\pi\hbar\delta(E-E_i) |\Psi_i^{(+)}\rangle \quad (*)$$

と書けば

$$|\Psi_i^{(+)}\rangle = |\Phi_i\rangle + \frac{1}{E+i0-H_0} V |\Psi_i^{(+)}\rangle$$

とリップマン-シュインガーの方程式が導ける．なおここで (*) は⁷¹

$$e^{-iH_0t/\hbar} U_+(t) |\Phi_i\rangle = e^{-iE_i t/\hbar} |\Psi_i^{(+)}\rangle$$

この左辺はシュレディンガー表示の波動関数であり $|\Psi_i^{(+)}\rangle$ は定常状態の波動関数とみなせる．⁷²

$$\int_0^{\infty} d\tau e^{-0\tau/\hbar + i(E-H_0)\tau/\hbar} = \int_0^{\infty} d\tau e^{i(E+i0-H_0)\tau/\hbar} = -\frac{\hbar}{i} \frac{1}{E+i0-H_0} = -\frac{\hbar}{i} \left(P \frac{1}{E-H_0} - i\pi\delta(E-H_0) \right)$$

71

$$\begin{aligned}
|\Psi_i^{(+)}(E)\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(E-H_0)\tau/\hbar} U_+(\tau) |\Phi_i\rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(E-E_i)\tau/\hbar} |\Psi_i^{(+)}\rangle \\
e^{-iH_0\tau/\hbar} U_+(\tau) |\Phi_i\rangle &= e^{-iE_i\tau/\hbar} |\Psi_i^{(+)}\rangle
\end{aligned}$$

⁷²ここで相互作用表示の状態ベクトル $|\Psi(t)\rangle$ シュレディンガー表示の状態ベクトル $|\Psi(t)\rangle_S$ の間の関係より

$$e^{-iH_0t/\hbar} U_+(t) |\Phi_i\rangle = e^{-iH_0t/\hbar} |\Psi_i(t)\rangle = |\Psi_i(t)\rangle_S = e^{-iE_i t/\hbar} |\Psi_i^{(+)}\rangle$$

最後の議論で $|\Psi_i(t)\rangle$ が $|\Phi_i\rangle$ と同じエネルギー E_i を持つとした．精密には系を一辺 L の箱に入れて考え，そのときのエネルギー解像度よりゆっくりと断熱的に相互作用が加えられるものとする．さらにその相互作用はポテンシャルが局所的であることより $1/L^3$ 程度のエネルギーシフトのみをあたえることに注意して $L \rightarrow \infty$ の極限をとったと考える．

3.2 光学定理

さらに⁷³

$$T_{ji} \equiv -2\pi i \delta(E_i - E_j) \mathbf{T}_{ji} \text{ として}$$

$$\mathbf{T}_{ji} = \langle \Phi_j | V | \Psi_i^{(+)} \rangle$$

これから単位時間当たりの $i \rightarrow j$ への散乱確率は次のとおりとなる。⁷⁴

$$w_{ji} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_i - E_j) |\mathbf{T}_{ji}|^2$$

$|\Psi_i^{(+)}\rangle \approx |\Phi_i\rangle$ と近似した場合フェルミの黄金率と呼ばれる。

ここでまずグリーン関数について

$$G_0^+ = \frac{1}{E + i0 - H_0}$$

$$G^+ = \frac{1}{E + i0 - H} = \frac{1}{E + i0 - H_0 - V} = [(G_0^+)^{-1} - V]^{-1} = [(1 - VG_0^+)G_0^+{}^{-1}]^{-1}$$

$$= G_0^+ (1 - VG_0^+)^{-1} = G_0^+ + G_0^+ (VG_0^+) + G_0^+ (VG_0^+)^2 + \dots$$

$$= G_0^+ + (G_0^+ V) G_0^+ + (G_0^+ V)^2 G_0^+ + \dots = (1 - G_0^+ V)^{-1} G_0^+$$

73

$$|\Psi_i^{(+)}(E)\rangle = 2\pi\hbar \delta(E - E_i) |\Psi_i^{(+)}\rangle$$

$$\mathbf{T}_{ji} = \frac{1}{i\hbar} \langle \Phi_j | V | \Psi_i^{(+)}(E_j) \rangle$$

$$= -2\pi i \delta(E_j - E_i) \mathbf{T}_{ji} \text{ より}$$

$$\mathbf{T}_{ji} = \langle \Phi_j | V | \Psi_i^{(+)} \rangle$$

74

$$W_{ji} = 4\pi^2 (\delta(E_i - E_j))^2 |\mathbf{T}_{ji}|^2$$

$$= 4\pi^2 \delta(E_i - E_j) |\mathbf{T}_{ji}|^2 \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right) \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(E_i - E_j)\tau/\hbar}$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_i - E_j) |\mathbf{T}_{ji}|^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\tau 1$$

$$w_{ji} = \frac{W_{ji}}{\int_{-\infty}^{\infty} d\tau 1} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_i - E_j) |\mathbf{T}_{ji}|^2$$

一方 LS 方程式を書き直して

$$|\Psi_i^{(+)}\rangle = |\Phi_i\rangle + G_{0,i}^{(+)}V|\Psi_i^{(+)}\rangle = (1 + G_{0,i}^{+}V + (G_{0,i}^{+}V)^2 + \dots)|\Phi_i\rangle = (1 + G_i^{+}V)|\Phi_i\rangle,$$

$$G_{0,i}^{+} = G_0^{+}(E_i), \quad G_i^{+} = G^{+}(E_i)$$

$$V|\Psi_i^{(+)}\rangle = V(1 + G_i^{+}V)|\Phi_i\rangle \equiv T(E_i)|\Phi_i\rangle$$

$$T(E) = V(1 + G^{+}(E)V)$$

$$|\Psi_i^{(+)}\rangle = (1 + G_0^{+}(E_i)T(E_i))|\Phi_i\rangle$$

ここで $|\Psi_i^{(+)}\rangle$ と $|\Phi_i\rangle$ とは前ページの用にユニタリ変換で結び付いているので

$$\langle\Psi_j^{(+)}|\Psi_i^{(+)}\rangle = \langle\Phi_j|\Phi_i\rangle$$

一方

$$\mathbf{T}_{ji} = \langle\Phi_j|V|\Psi_i^{(+)}\rangle = \langle\Phi_j|T_i|\Phi_i\rangle$$

と書いて

$$\langle\Psi_j^{(+)}|\Psi_i^{(+)}\rangle = \langle\Phi_j|\Phi_i\rangle + \langle\Phi_j|G_{0i}^{+}T_i|\Phi_i\rangle + \langle\Phi_j|T_j^{*}G_{0,j}^{+*}|\Phi_i\rangle + \langle\Phi_j|T_j^{*}G_{0,j}^{+*}G_{0,i}^{+}T_i|\Phi_i\rangle$$

より⁷⁵

$$-\text{Im} \mathbf{T}_{ii} = \pi \sum_k \delta(E_i - E_k) |\mathbf{T}_{ik}|^2$$

75

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{1}{E_i - E_j + i0} \langle\Phi_j|T_i|\Phi_i\rangle + \frac{1}{E_j - E_i - i0} \langle\Phi_j|T_j^{*}|\Phi_i\rangle \\ &\quad + \sum_k \langle\Phi_j|T_j^{*}G_{0,j}^{+*}|\Phi_k\rangle \langle\Phi_k|G_{0,i}^{+}T_i|\Phi_i\rangle \\ &= \frac{1}{E_i - E_j + i0} \langle\Phi_j|T_i|\Phi_i\rangle + \frac{1}{E_j - E_i - i0} \langle\Phi_j|T_j^{*}|\Phi_i\rangle \\ &\quad + \sum_k \frac{1}{E_j - E_k - i0} \frac{1}{E_i - E_k + i0} \langle\Phi_j|T_j^{*}|\Phi_k\rangle \langle\Phi_k|T_i|\Phi_i\rangle \\ &= \left(P \frac{1}{E_i - E_j} - i\pi\delta(E_i - E_j) \right) (\mathbf{T}_{ji} - \mathbf{T}_{ij}^{*}) \\ &\quad + \frac{1}{E_j - E_i - i0} \sum_k \left(\frac{1}{E_i - E_k + i0} - \frac{1}{E_j - E_k - i0} \right) \mathbf{T}_{kj}^{*} \mathbf{T}_{ki} \\ &= \left(P \frac{1}{E_i - E_j} - i\pi\delta(E_i - E_j) \right) (\mathbf{T}_{ji} - \mathbf{T}_{ij}^{*}) \\ &\quad + \frac{1}{E_j - E_i - i0} \sum_k \left(P \frac{1}{E_i - E_k} - P \frac{1}{E_j - E_k} - i\pi(\delta(E_i - E_k) + \delta(E_j - E_k)) \right) \mathbf{T}_{kj}^{*} \mathbf{T}_{ki} \\ &= \left(P \frac{1}{E_i - E_j} - i\pi\delta(E_i - E_j) \right) (\mathbf{T}_{ji} - \mathbf{T}_{ij}^{*}) \\ &\quad - \left(P \frac{1}{E_i - E_j} - i\pi\delta(E_i - E_j) \right) \sum_k \left(P \frac{1}{E_i - E_k} - P \frac{1}{E_j - E_k} - i\pi(\delta(E_i - E_k) + \delta(E_j - E_k)) \right) \mathbf{T}_{kj}^{*} \mathbf{T}_{ki} \end{aligned}$$

なおこれは $S^\dagger S = 1$ に等しい。⁷⁶

またこれは次の光学定理とも同値である。⁷⁷

$$\text{Im } f(0) = \frac{k_i}{4\pi} \int d\Omega_k |f(\theta_k)|^2$$

よって

$$(\mathbf{T}_{ji} - \mathbf{T}_{ij}^*) = \sum_k \left(P \frac{1}{E_i - E_k} - P \frac{1}{E_j - E_k} - i\pi(\delta(E_i - E_k) + \delta(E_j - E_k)) \right) \mathbf{T}_{kj}^* \mathbf{T}_{ki}$$

ここで $i = j$ として

$$2i \text{Im } \mathbf{T}_{ji} = \sum_k -2i\pi\delta(E_i - E_k) |\mathbf{T}_{ki}|^2$$

⁷⁶

$$\begin{aligned} (1 + T^\dagger)(1 + T) &= 1 \\ -(T + T^\dagger) &= T^\dagger T \\ 2\pi i \delta(E_i - E_j) (\mathbf{T}_{ij} - \mathbf{T}_{ij}^\dagger) &= -(2\pi i)^2 \sum_k \delta(E_i - E_k) \delta(E_k - E_j) \mathbf{T}_{ik}^\dagger \mathbf{T}_{kj} \\ 2\pi i \delta(E_i - E_j) (\mathbf{T}_{ij} - \mathbf{T}_{ji}^*) &= 4\pi^2 \delta(E_i - E_j) \sum_k \delta(E_i - E_k) \mathbf{T}_{ki}^* \mathbf{T}_{kj} \\ i = j \text{ として } -\text{Im } \mathbf{T}_{ii} &= \pi \sum_k \delta(E_i - E_k) |\mathbf{T}_{ik}|^2 \end{aligned}$$

⁷⁷

$$\begin{aligned} \sum_k \delta(E_i - E_k) &= \int dk k_k^2 \delta\left(\frac{\hbar^2}{2m}(k_i^2 - k_k^2)\right) \int d\Omega_k \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} \int dk k_k^2 \frac{1}{2k_k} \delta(k_i - k_k) \int d\Omega_k \\ f(\theta_{ij}) &= -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{(2\pi)^3}{4\pi} \mathbf{T}_{ij} \\ \text{Im } f(0) &= \pi \frac{2m}{\hbar^2} \int dk k_k \frac{1}{2k_k} \delta(k_i - k_k) k_k^2 \frac{\hbar^2}{2m} \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \int d\Omega_k |f(\theta_k)|^2 \\ &= \frac{k_i}{4\pi} \int d\Omega_k |f(\theta_k)|^2 \end{aligned}$$