— 量子力学第 3 問題: (散乱理論) —

1 次のような一次元箱型ポテンシャル中の散乱問題を転送行列により解こう。

$$V(x)=\begin{cases}0 \in (-\infty,-a)\\ V_0 \in (-a,a)\\ 0 \in (a,\infty)\end{cases}$$

i ポテンシャルが有限の領域の内部、外部の波数を k_i, k_o として転送行列を求めよ。

ii 完全透過の条件をもとめよ。

iii 束縛状態が存在する条件を求めよ。

iv 長さ $2a$ の箱型ポテンシャル中での束縛状態との関係を議論せよ。

v $V_0>0$ が入射波のエネルギーより十分大きい場合の透過率をもとめ、a に対する依存性を議論せよ。

vi $V(x)=g\delta(x)$ の場合を箱型ポテンシャルから構成するにはどのような極限を考えればよいか議論せよ。またそれを用いて透過率、反射率を求めよ。

2 一次元デルタ関数型ポテンシャル中の散乱問題をポテンシャルを $V(x)=g\delta(x)$ として積分方程式の方法で扱おう。

i 積分方程式から $x>0$ における波動関数を求めよ。

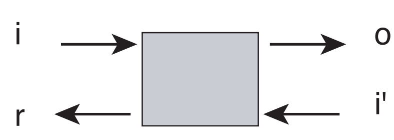
ii 積分方程式から $x<0$ における波動関数を求めよ。

iii 透過係数 $\mathcal{T}$ と反射係数 $\mathcal{R}$ を入射粒子の波数 k の関数としてもとめよ。

iv 次の量を計算せよ。

$$\frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty} dk\,\frac{d}{dk}\mathrm{Im}\,\log\mathcal{T}(k+i0)$$

3 一般的な一次元の散乱問題を考えよう。



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。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。

i シュレディンガー方程式から $|\psi_i|^2 - |\psi_r|^2 = |\psi_o|^2 - |\psi_{i'}|^2$ を導け。[1]

ii 散乱行列 S を次のように定義して $\begin{pmatrix} \psi_r \\ \psi_o \end{pmatrix} = \boldsymbol{S} \begin{pmatrix} \psi_i \\ \psi_{i'} \end{pmatrix}$ この $\boldsymbol{S}$ がユニタリであることを示せ。[2]

iii 転送行列 $\boldsymbol{T}$ を次のように定義して

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

$\boldsymbol{T}^\dagger \boldsymbol{J} \boldsymbol{T} = \boldsymbol{J}$, $\boldsymbol{J} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ が成立することを示せ。[3]

iv 散乱行列 $\boldsymbol{S}$ を $\boldsymbol{S} = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix}$ としたとき $\boldsymbol{T} = \begin{pmatrix} t^{*-1} & r' t'^{-1} \\ -t'^{-1} r & t'^{-1} \end{pmatrix}$ と書けることを示せ。(ヒント $\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^\dagger = \boldsymbol{I}$ を使う。) [4]

v $t = t'$: 実, $r' = -r$: 実 としたときつぎの関係式を示せ.

$$(\boldsymbol{T}\boldsymbol{T}^\dagger + (\boldsymbol{T}\boldsymbol{T}^\dagger) + 2)^{-1} = \frac{|t|^2}{4} \boldsymbol{I}$$

4 次式をみたすグリーン関数を考える。$\delta(x)$ はディラックのデルタ関数である。

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

i $z = E \pm i0$、($E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > 0$:実) としフーリエ解析の方法で次の 3 次元自由粒子系のグリーン関数 $G_0^\pm$ を求めよ。

ii $G_0^\pm$ は $x \to \pm\infty$ でどんな境界条件を満たすか議論せよ。

iii $E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} < 0$ の時のグリーン関数を求め、$k = i\kappa$ としたときの G_0^+ との関係を議論せよ。

5

$$\begin{aligned} \vec{J}(\vec{r}) &= \left(\frac{\hbar}{2mi} \right) \left[\Psi^*(\vec{r}) \vec{\nabla} \Psi(\vec{r}) - (\vec{\nabla} \Psi^*(\vec{r})) \Psi(\vec{r}) \right] \\ \rho &= |\Psi(\vec{r})|^2 \end{aligned}$$

について連続の方程式

$$\partial_t \rho + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0$$

を導け。

6 3 次元極座標 $(x, y, z) = r(\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$ で運動エネルギー $\frac{p^2}{2m}$ の表式を求めよう。

i 角運動量 $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ に対して $\vec{r}$ と $\vec{p}$ の交換関係を用いて次の式を示せ。

$$\vec{L}^2 = r^2\vec{p}^2 - \left\{(\vec{r}\cdot\vec{p})^2 - i\hbar\vec{r}\cdot\vec{p}\right\}$$

ii 以下の式を用いて角運動量 $\vec{L}$ を極座標で求めよ。

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

iii

$$\vec{r}\cdot\vec{p} = -i\hbar r\partial_r$$

を示せ。

iv

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

ただし、

$$p_r^2 = -\hbar^2(\partial_r^2 + \frac{2}{r}\partial_r)$$

を示せ。

7 角運動量の固有関数としての球面調和関数 $Y_{\ell m}(\theta,\phi) = \Theta_{\ell m}(\theta)\Phi_m(\phi)$ が次のように与えられることを示そう。

$$\begin{aligned}
\Theta_{\ell m} =& (-1)^{\frac{m+|m|}{2}}\sqrt{\frac{2\ell+1}{2}\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}}P_\ell^{|m|}(\cos\theta), \\
P_\ell^k(\cos\theta) =& \sin^k\theta\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^k P_\ell(\cos\theta), \quad k \geq 0 \\
P_\ell(x) =& \frac{1}{2^\ell \ell!}\frac{d^\ell}{dx^\ell}(x^2-1)^\ell \\
\Phi_m =& \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi}
\end{aligned}$$

なお

$$
\begin{aligned}
L_x =& -i\hbar\left(-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\\
L_y =& -i\hbar\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\\
L_z =& -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\\
L_\pm Y_{\ell m} =&(L_x \pm iL_y)Y_{\ell m} = \hbar\sqrt{(\ell\mp m)(\ell\pm m+1)}Y_{\ell m\pm 1}
\end{aligned}
$$

i $L_zY_{\ell m} = m\hbar Y_{\ell m}$ より $\Phi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi}$ となることを確認せよ.

ii $L_+Y_{\ell\ell} = 0$ から $\Theta_\ell(\theta) = (-)^\ell \sin^\ell\theta$ ととれることを示せ. ただし規格化は $\displaystyle\int_0^\pi d\theta\, \sin\theta|\Theta(\theta)|^2 = 1$ ととる.

iii $\ell \geq m$ として $L_-^m Y_{\ell\ell}$ から次の関係式を示せ.

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

iv $m = 0$ として $\Theta_{\ell 0} = \sqrt{\dfrac{2\ell+1}{2}}P_\ell(\cos\theta)$ を示せ.

v $m \leq 0$ について次の関係式を示せ.

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

vi $\ell \geq m \geq 0$ として $L_+^m Y_{\ell 0}$ から次の関係式を示せ。

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

vii $\Theta_{\ell -m} = (-)^m\Theta_{\ell m}$ を示せ。

8 ボルン近似の具体的な計算を行おう。この近似においては散乱振幅は

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

となる。ここで θ は散乱ベクトルが z 軸となす角である。以下 $\vec{K} = \vec{k}' - \vec{k}$ として $\vec{K}$ 方向の極座標で計算せよ。

i 次の式を導け。

$$
\sin\theta d\theta = \frac{1}{k^2}KdK
$$

ii 次の式を導け。

$$f_B(\theta_{\vec{k}}) = -\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)\frac{1}{K}\int drr\sin(Kr)V(r)$$

iii 以下のポテンシャルについて散乱振幅をボルン近似で具体的に計算せよ。

$$V(r) = \frac{-Ze^2e^{-\mu r}}{r}, \quad (\mu \to 0)$$

9 球ベッセル関数、球ノイマン関数が自由空間の動径方向の波動関数が満たす方程式を満たすことを確認しよう

i

$$h(x) = -i(-x)^\ell\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^\ell\left(\frac{e^{ix}}{x}\right) = i(-)^{\ell+1}\sum_n\frac{1}{n!!(n-1-2\ell)!!}i^nx^{n-\ell-1}$$

を示せ。

ii

$$\begin{aligned} h'' \quad + \quad & 2x^{-1}h' + 1 - \ell(\ell+1)x^{-2} = \\ & i(-)^{\ell+1}\sum_n\frac{1}{n!!(n-1-2\ell)!!}i^n \\ & \times\Big[\big((n-\ell-1)(n-\ell-2)+2(n-\ell-1)-\ell(\ell+1)\big)x^{n-\ell-3}+x^{n-\ell-1}\Big] \end{aligned}$$

を示し、これが 0 に等しいことを示せ。

iii これとは別に下のように表される球ベッセル関数 $j_\ell(x)$, 球ノイマン関数 $n_\ell(x)$ が h と同じ微分方程式を満たすことを数学的帰納法で示せ。

$$j_\ell \quad = \quad (-x)^\ell\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^\ell\left(\frac{\sin x}{x}\right), \quad n_\ell = -(-x)^\ell\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^\ell\left(\frac{\cos x}{x}\right)$$

10

$$e^{ikr\cos\theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)i^\ell j_\ell(kr)P_\ell(\cos\theta)$$

を確認しよう。まず両辺ともにラプラス方程式の原点で正則な解であることから $(kr\cos\theta)$ についての展開とできることに注意する。

i

$$R = \sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)i^\ell j_\ell(kr)P_\ell(\cos\theta)$$

において $P_\ell(\cos\theta)$ は $\cos\theta$ について ℓ 次以下 $j_\ell(kr)$ は kr について ℓ 次以上であることを考え, $(kr\cos\theta)$ の ℓ 次の項を求めよ。ただし $P_\ell(x) = \frac{1}{2^\ell\ell!}\frac{d^\ell}{dx^\ell}(x^2-1)^\ell$ である。

ii

$$L = e^{ikr\cos\theta}$$

の ℓ 次の項と比較して議論を完結せよ。

11 ℓ-部分波の動径部分の波動関数を $R_\ell(r)$ として以下の考察をせよ。

i $\mathcal{R}_\ell(r) = rR_\ell$ が次の方程式を満たすことを示せ.

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

ii 以下 $V(r) = 0, r > a$ である井戸型ポテンシャルを考える。まず散乱体のない領域 $r > a$ での波動関数を

$$R_\ell(r) = C_\ell \frac{1}{kr}\left\{S_\ell e^{ikr} - (-1)^\ell e^{-ikr}\right\}$$

と書いて散乱状態に関して $|S_\ell| = 1$ を示せ。

iii 次の関係式を導け。ただし $f_\ell^{in} = \frac{1}{k}\frac{dlogR}{dr}\Big|_{r=a}$ である。

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

iv 以下の表式を導け。

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

v 半径 $r = a$ の剛体球がある場合、f_ℓ^{in} について議論し、次の表式を導け。また低エネルギーの場合 ($ka << 1$) を議論せよ。

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

vi S 波 $\ell = 0$ を考え $V(r) = V_0 \ (r \le a),\ 0$(それ以外) の場合、ポテンシャルの有限な領域での波動関数が

$$\mathcal{R} = C\sin Kr, \quad K^2 = k^2 - U_0, \quad \frac{\hbar^2 U_0}{2m} = V_0$$

となることを示せ。

vii 上の設定に続いて S 波の位相のずれが次のようになることを示せ。また低エネルギー $ka << 1$ での振舞を議論せよ。

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

viii $E < 0$ の時 $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ で定まる k を用いて ($k \to i\kappa,\ (\kappa > 0)$)

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

となるが、これから束縛状態に関しては

$$S_\ell \to \infty$$

を導け。またこれと散乱状態との関係を議論せよ。

Notes

[1] ロンスキー行列式を計算する。

[2] 保存則は

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

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

[3] 保存則は

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

より

$$\boldsymbol{T}^\dagger\boldsymbol{J}\boldsymbol{T} =\boldsymbol{J}$$

[4] ユニタリティーは

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

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

この関係式のもとで S 行列の定義より

$$\psi_r =r\psi_i+t'\psi_{i'}$$
$$\psi_o =t\psi_i+r'\psi_{i'}$$

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

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

これから

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

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

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