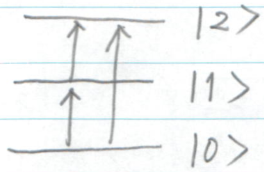
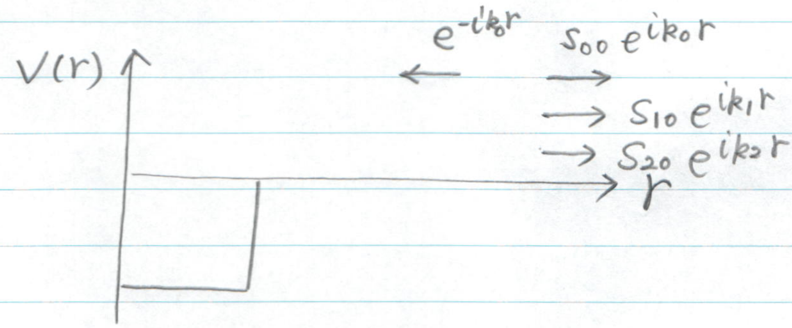
・なぜ S「行列」とよぶのか.

非弾性散乱があるとき



散乱の途中で標的粒子が励起される
(入射粒子でもよい)



$S_{\alpha'\alpha}$: "チャンネル" α で入射してチャンネル α' で出ていく振幅

弾性散乱しか考えないときには $S_{\alpha\alpha}$ のみ。

(note) 非弾性散乱を考えると $|S_{00}|<1$

弾性散乱のS行列

※ フラックスの保存は $\sum_{\alpha'}|S_{\alpha'0}|^2=1$

(S行列のユニタリー性)

これを表現するのに光学ポテンシャルがよく用いられる

$$V_{opt}(r)=V(r)-iW(r) \qquad (W>0)$$

弾性チャンネルに対する有効ポテンシャル

(note) $\boldsymbol{j} = \frac{\hbar}{2i\mu}\left(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*\right)$

$$\Downarrow \quad \nabla \cdot \boldsymbol{j} = \frac{\hbar}{2i\mu}\left(\cancel{\nabla\psi^* \cdot \nabla\psi} + \psi^* \nabla^2 \psi - \cancel{\nabla\psi \cdot \nabla\psi^*} - \psi \nabla^2 \psi^*\right)$$

$$\begin{cases} \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V - iW\right)\psi = E\psi \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V + iW\right)\psi^* = E\psi^* \end{cases}$$

$$= \frac{\hbar}{2i\mu} \cdot \left(-\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)\left\{\psi^*(E - V + iW)\psi - \psi(E - V - iW)\psi^*\right\}$$

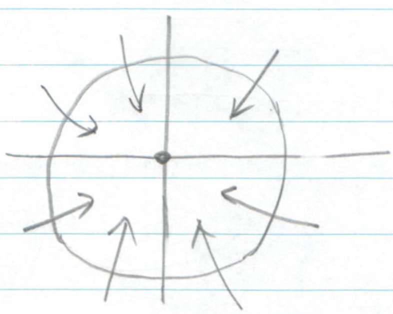
$$= -\frac{2}{\hbar}|\psi(\boldsymbol{r})|^2 W(\boldsymbol{r}) \quad < 0 \quad (\text{for } W > 0)$$

$$\Downarrow \quad \int \boldsymbol{j} \cdot \boldsymbol{n}\, dS = \int_V \nabla \cdot \boldsymbol{j}\, d\boldsymbol{r} \quad < 0 \quad (\text{フラックスの減少})$$

・吸収断面積

$$\psi(\boldsymbol{r}) \to \frac{i}{2k}\sum_l (2l+1)\, i^l \left[\frac{e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2})}}{r} - S_l \frac{e^{i(kr - \frac{l\pi}{2})}}{r}\right] P_l(\cos\theta)$$

半径 r の球面に入る全内向フラックス：



$$\psi_{in}(\boldsymbol{r}) = \frac{i}{2k}\sum_l (2l+1)\, i^l \frac{e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2})}}{r} P_l(\cos\theta)$$

$$= \frac{i}{2kr}\sum_l (2l+1)(-)^l e^{-ikr} P_l(\cos\theta)$$

$$\boldsymbol{j}_{in} = \frac{k\hbar}{\mu} \cdot \frac{1}{r^2}\left|\frac{i}{2k}\sum_l (2l+1)(-)^l P_l(\cos\theta)\right|^2 \boldsymbol{e}_r$$

$$\Downarrow \quad j_{in}^{(net)} = \int r^2 d\Omega\, \boldsymbol{j}_{in} \cdot \boldsymbol{e}_r = \frac{k\hbar}{\mu} \cdot \frac{1}{4k^2}\sum_l (2l+1) \cdot 4\pi$$

$$= \frac{k\hbar}{\mu} \cdot \frac{\pi}{k^2}\sum_l (2l+1)$$

全外向フラックス:

$$\psi_{out}(\mathbf{r}) = \frac{i}{2k}\sum_l (2l+1)\, i^l S_l \frac{e^{i(kr-\frac{l\pi}{2})}}{r} P_l(\cos\theta)$$

$$\downarrow \quad j_{out}^{net} = \frac{k\hbar}{\mu}\cdot\frac{\pi}{k^2}\sum_l (2l+1)\,|S_l|^2$$

$$\downarrow \quad \Delta j = j_{in}^{net} - j_{in}^{out} = \frac{k\hbar}{\mu}\cdot\frac{\pi}{k^2}\sum_l (2l+1)\left(1-|S_l|^2\right)$$

$\downarrow$

吸収断面積: $\boxed{\sigma_{abs} = \frac{\Delta j}{j_{inc}} = \frac{\pi}{k^2}\sum_l (2l+1)\left(1-|S_l|^2\right)}$

(note) $|S_l| = 1$ なら $\sigma_{abs} = 0$.

(note)

$$\sigma_{tot} = \sigma_{el} + \sigma_{abs} = \frac{\pi}{k^2}\sum_l (2l+1)\,|1-S_l|^2 + \frac{\pi}{k^2}\sum_l (2l+1)\left(1-|S_l|^2\right)$$

$$= \frac{\pi}{k^2}\sum_l (2l+1)\left(1 - S_l - S_l^* + \cancel{|S_l|^2} + 1 - \cancel{|S_l|^2}\right)$$

$$= \frac{2\pi}{k^2}\sum_l (2l+1)\left(1 - \frac{S_l + S_l^*}{2}\right)$$

$$\mathrm{Im}\, f(0) = \mathrm{Im}\sum_l (2l+1)\frac{S_l - 1}{2ik}$$

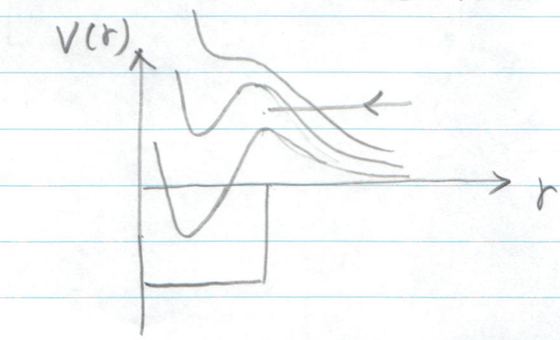
$$= -\sum_l (2l+1)\frac{\mathrm{Re}(S_l) - 1}{2k} = \frac{1}{2k}\sum_l (2l+1)\left(1 - \frac{S_l + S_l^*}{2}\right)$$

$$= \frac{k}{4\pi}\sigma_{tot}$$ (拡張された光学定理)

§ 低エネルギー散乱と散乱長

$\psi(\mathbf{r}) = \dfrac{u_\ell(r)}{r} Y_{\ell m}(\hat{r})$ と書くと

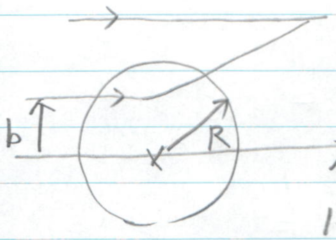
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \underbrace{\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2}}_{\text{遠心力ポテンシャル}} - E\right) u_\ell(r) = 0$$



反応が起きるためにはポテンシャルのレンジまでトンネルしなければならない

↓

大きな ℓ は寄与しない。



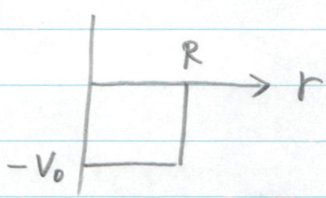
古典的には標的から相互作用レンジRの内側に入る部分波($b \leq R$)のみが寄与 → $\ell_{max} = kR$

↓ 部分波解析は低エネルギーで特に有効。

$E \sim 0$ では $\ell = 0$ のみが寄与

以下、$E \sim 0$, $\ell = 0$ を考える。

(例)井戸型ポテンシャル



$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & (r \leq R) \\ 0 & (r > R) \end{cases}$$

波動関数: $$u_0(r) = \begin{cases} A \sin \tilde{k} r & (r \leq R) \\ B \sin kr + C \cos kr & (r > R) \end{cases}$$

$$k = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}, \quad \tilde{k} = \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}(E + V_0)}$$

(note)

$$B\sin kr + C\cos kr = B\left(\sin kr + \frac{C}{B}\cos kr\right)$$

$$\parallel$$

$$B'\sin(kr+\delta) = B'(\sin kr\cos\delta + \cos kr\sin\delta)$$

$$= B'\cos\delta\,(\sin kr + \tan\delta\cos kr)$$

$$\Downarrow\quad \tan\delta = \frac{C}{B}.$$

$r=R$ での波動関数の接続

$$\begin{cases} A\sin\tilde{k}R = B\sin kR + C\cos kR \\ A\tilde{k}\cos\tilde{k}R = Bk\cos kR - Ck\sin kR \end{cases}$$

$$\downarrow$$

$$\frac{1}{\tilde{k}}\frac{\sin\tilde{k}R}{\cos\tilde{k}R} = \frac{\sin kR + \frac{C}{B}\cos kR}{k\cos kR - \frac{C}{B}k\sin kR}$$

$$\Downarrow$$

$$\tan\delta = \frac{C}{B} = \frac{k\cos kR\sin\tilde{k}R - \tilde{k}\sin kR\cos\tilde{k}R}{\tilde{k}\cos\tilde{k}R\cos kR + k\sin kR\sin\tilde{k}R}$$

$$\sim \frac{\sin\tilde{k}R - \tilde{k}R\cos\tilde{k}R}{\tilde{k}\cos\tilde{k}R}\cdot k \qquad (k\to 0)$$

$$\Downarrow\quad k\cot\delta = \frac{\tilde{k}\cos\tilde{k}R}{\sin\tilde{k}R - \tilde{k}R\cos\tilde{k}R} = \text{const.}$$

$$\equiv -\frac{1}{a} \qquad (a:\text{散乱長})$$

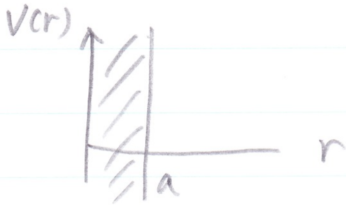
(note) $l\neq 0$ では $\delta_l \propto k^{2l+1}$ となる。

(note) $E \ll |V_0|$ のとき, $k\to -k$ にすると
$\tan\delta \to -\tan\delta$

$$\Downarrow\quad k\cot\delta \sim -\frac{1}{a} + \frac{1}{2}\underbrace{r_{\text{eff}}}_{\text{有効距離}}k^2 + \cdots$$

cf. 剛体球による散乱 (s-wave)

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



$$u(r) = \sin(kr+\delta)$$

$$u(r=a) = 0 \quad \Rightarrow \quad ka+\delta = 0$$

$$\Rightarrow \quad \underbrace{\frac{k}{\delta}}_{\wr\ k\cot\delta} = -\frac{1}{\underbrace{a}_{\text{散乱長}}}$$

散乱長 $\leftrightarrow$ 剛体球の半径.

$$k\cot\delta \sim -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_{eff} k^2$$

井戸型ポテンシャルに限らず、他のポテンシャルでも同じ振るまいをする。

⇕ 低エネルギー散乱は a, r_{eff} の2つのパラメータのみで記述でき、ポテンシャルの詳細にはよらない。(ポテンシャルの詳細を知るためには高エネルギー散乱が必要。)

・散乱長の意味

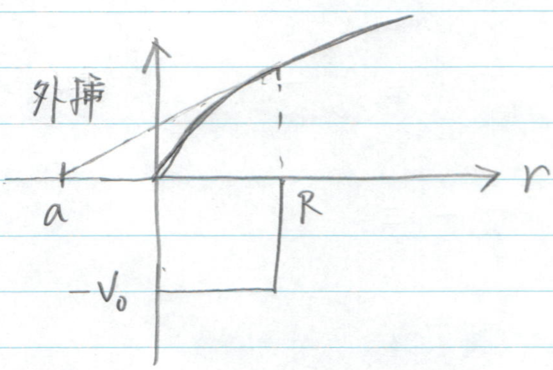
$r \geq R$ で $\quad u_0(r) \propto \sin(kr+\delta) \sim kr+\delta \quad (k\to 0)$

$$= k\left(r+\frac{\delta}{k}\right)$$

$$-\frac{1}{a} = k\cot\delta \sim \frac{k}{\delta} \quad (k\to 0)$$

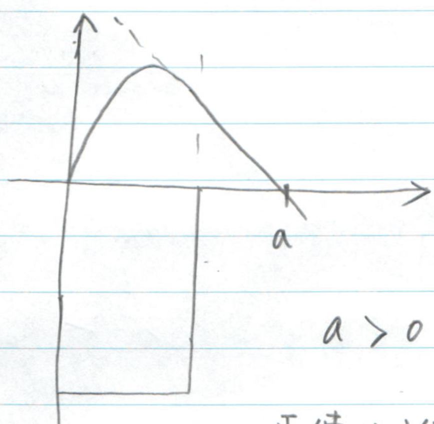
⇕ $\quad u_0(r) \propto (r-a) \quad (k\to 0)$

これは $r=a$ でゼロ.



$a<0$

⇒



$a>0$

束縛状態があるとき

ゼロ・エネルギーで束縛するときは

$a=\infty$ (ユニタリー極限)

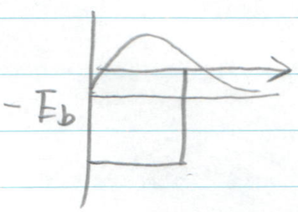
・束縛状態からのアプローチ

井戸型ポテンシャル

$$a = (\tilde{k}R - \tan\tilde{k}R)\cdot\frac{1}{\tilde{k}} = R\left(1 - \frac{\tan\tilde{k}R}{\tilde{k}R}\right)$$

$$\tilde{k} = \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}(E+V_0)}$$

束縛状態がある時



$$u_B(r) = \begin{cases} A\sin\tilde{k}'r & (r \leq R) \\ Be^{-\tilde{\kappa}r} & (r > R) \end{cases}$$

$$\tilde{k}' = \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}(V_0 - E_b)}$$

$$\tilde{\kappa} = \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}E_b}$$

(note) 弱束縛であれば $E_b \sim 0$,
$\tilde{k}' \sim \tilde{k}$

波動関数の接続： $\dfrac{\tilde{k}'\cos\tilde{k}'R}{\sin\tilde{k}'R} = \dfrac{-\tilde{\kappa}e^{-\tilde{\kappa}R}}{e^{-\tilde{\kappa}R}}$

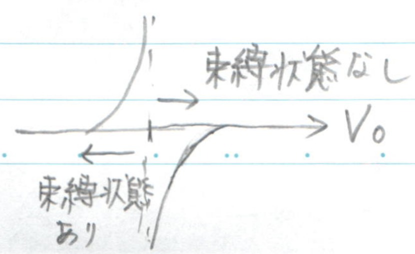
↓

$$a = R\left(1 - \frac{\tan\tilde{k}R}{\tilde{k}R}\right) \sim R\left(1 - \frac{\tan\tilde{k}'R}{\tilde{k}'R}\right)$$

$$= R + \frac{1}{\tilde{\kappa}} \sim \frac{1}{\tilde{\kappa}} \quad (>0)$$

$E_b \to 0$ では $\tilde{\kappa} \to 0$

↓ $a \to +\infty$



・有効ポテンシャル

$$k\cot\delta \sim -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_{\mathrm{eff}} k^2$$

低エネルギーではポテンシャルの詳細は重要ではない。

$\rightsquigarrow$ $v_{\mathrm{eff}}(\mathbf{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu} a\,\delta(\mathbf{r})$ ← 係数は散乱長が a になるように決定

を使った解析をしても答えは変わらない。
(ゼロ・レンジなので解析がしやすい。)

※低エネルギーでは波長が長くなる
→ ポテンシャルのレンジの(多少の)違いは見えない。

cf. 冷却原子の研究など (BEC)

(note) $f(\theta) \equiv f(\mathbf{k},\mathbf{k}') = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d\mathbf{r}'\, e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} \underbrace{v(\mathbf{r}')}_{\substack{\parallel \\ g\,\delta(\mathbf{r}')}} \psi(\mathbf{r}')$

$$= -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\cdot g\,\psi(0)$$

リップマン・シュウィンガー方程式: $\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \int d\mathbf{r}'\, G^{(+)}(\mathbf{r},\mathbf{r}') \times v(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')$

$$= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - g\,G^{(+)}(\mathbf{r},0)\,\psi(0)$$

$$\rightsquigarrow \psi(0) = 1 - g\,G^{(+)}(0,0)\,\psi(0)$$

$$\Rightarrow \quad f(\mathbf{k},\mathbf{k}') = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\cdot g\left(1 - g\,G^{(+)}(0,0)\,\psi(0)\right)$$

$$= -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}g - g\,G^{(+)}(0,0)\,f(\mathbf{k},\mathbf{k}')$$

(note) $G^{(+)}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \int\frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3}e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}\cdot\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{1}{k'^2-k^2-i\eta}\times e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'}$

$$\Rightarrow \quad f(\mathbf{k},\mathbf{k}') = -\frac{\mu g}{2\pi\hbar^2} - \frac{2\mu g}{\hbar^2}f(\mathbf{k},\mathbf{k}')\int\frac{d\mathbf{k}''}{(2\pi)^3}\frac{1}{k''^2-k^2-i\eta}$$

$$= -\frac{\mu g}{2\pi\hbar^2} - \frac{2\mu g}{\hbar^2}f(\mathbf{k},\mathbf{k}')\cdot\frac{4\pi}{(2\pi)^3}\underbrace{\int_0^{k_c}k''^2dk''\frac{1}{k''^2-k^2-i\eta}}_{(k\sim 0)}$$

$$\int_0^{k_c}\cancel{k''^2}dk''\frac{1}{\cancel{k''^2}} = k_c$$

$$= -\frac{\mu g}{2\pi\hbar^2} - \frac{2\mu g}{\hbar^2}\cdot\frac{k_c}{2\pi^2}f(\mathbf{k},\mathbf{k}')$$

部分波展開

$$f(\theta) = \sum_l(2l+1)\frac{S_l-1}{2ik}\sum_m Y_{lm}^*(\hat{k})Y_{lm}(\hat{k}')\cdot\frac{4\pi}{2l+1}$$

$$\sim \frac{S_0-1}{2ik} \qquad (E\sim 0)$$

$$= \frac{e^{2i\delta_0}-1}{2ik} \sim \frac{2i\delta}{2ik} = \frac{\delta}{k} \sim -a$$

$k\cot\delta \sim \frac{k}{\delta} \sim -\frac{1}{a}$

$$\Rightarrow \quad -a = -\frac{\mu g}{2\pi\hbar^2} + \frac{2\mu g}{\hbar^2}\cdot\frac{k_c}{2\pi^2}a = -\frac{\mu g}{2\pi\hbar^2}\left(1 - \frac{2k_c}{\pi}a\right)$$

$$\Rightarrow \quad g = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu}a\cdot\frac{1}{1-\frac{2k_c a}{\pi}} \sim \frac{2\pi\hbar^2}{\mu}a \qquad (k_c a \ll 1 \text{ なら})$$

cf. H. Esbensen et al., PRC 56 (97) 3054
Fetter-Walecka, Eqs. (11.14), (11.53)

§. 共鳴散乱

S行列が $\underbrace{}_{}^{\text{あるlで}}$ $E = E_R - i\frac{\Gamma}{2}$ に一位の極(ポール)を持つとする。
このとき、

$$\boxed{S_l(E) = e^{2i\delta_{bg}(E)} \cdot \frac{E - E_R - i\frac{\Gamma}{2}}{E - E_R + i\frac{\Gamma}{2}}} = e^{2i\delta_{bg}}\left(1 - \frac{i\Gamma}{E - E_R + i\frac{\Gamma}{2}}\right)$$

となる。$\delta_{bg}(E)$ は E のゆるやかな関数(バックグラウンド位相差)。$|S_l(E)| = 1$ に注意。

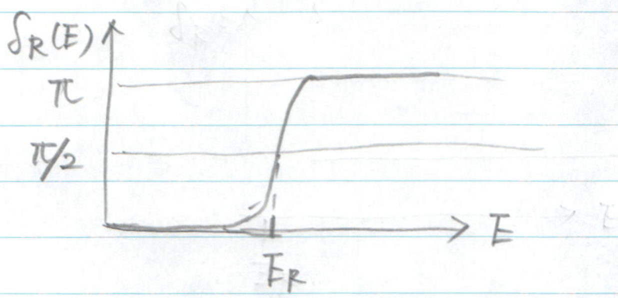
(note) $E - E_R - i\frac{\Gamma}{2} = c\,e^{i\delta_R(E)}$ とすると(cは実数)

$$S_l(E) = e^{2i\delta_{bg}(E)} \frac{c\,e^{i\delta_R(E)}}{c\,e^{-i\delta_R(E)}} = e^{2i\underbrace{(\delta_{bg}(E) + \delta_R(E))}_{\delta_l(E)}}$$

(note) $E - E_R - i\frac{\Gamma}{2} = c\,e^{i\delta_R} = c(\cos\delta_R + i\sin\delta_R)$

$$\rightsquigarrow \tan\delta_R = \frac{-\frac{\Gamma}{2}}{E - E_R}$$

$$\rightsquigarrow \boxed{\delta_l(E) = \tan^{-1}\left(\frac{-\frac{\Gamma}{2}}{E - E_R}\right) + \delta_{bg}(E)}$$



$\delta_R(E)$ は $E = E_R$ で $\pi/2$ を切る。

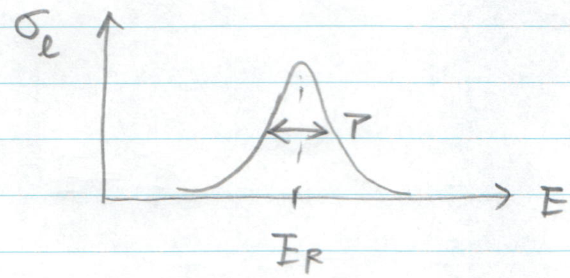
今, 簡単のために $\delta_{bg}(E)=0$ とすると,

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\sin^2\delta_l = \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\cdot\frac{\tan^2\delta_l}{1+\tan^2\delta_l}$$

$$= \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\frac{\frac{\frac{\Gamma^2}{4}}{(E-E_R)^2}}{1+\frac{\frac{\Gamma^2}{4}}{(E-E_R)^2}}$$

$$= \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\cdot\frac{\frac{\Gamma^2}{4}}{(E-E_R)^2+\frac{\Gamma^2}{4}}$$

(Breit-Wigner の公式)

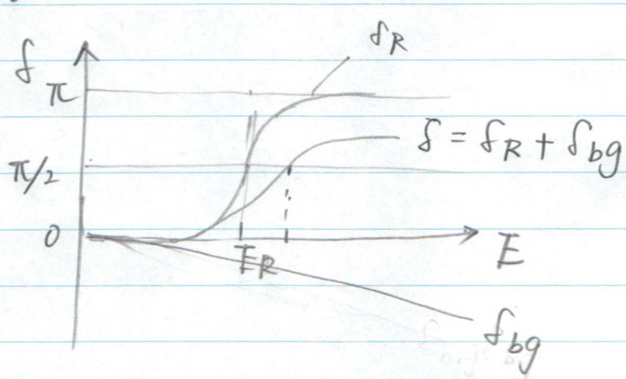


共鳴散乱

共鳴は $\delta_R(E)$ が $\frac{\pi}{2}$ を切るところ。

(note) よくある誤解。「共鳴エネルギーは $\delta(E)$ が $\pi/2$ を切るところ」 → これは間違い。一般的に $\delta_{bg}(E)$ のために $E=E_R$ で $\delta=\pi/2$ になるとは限らない。

(例)

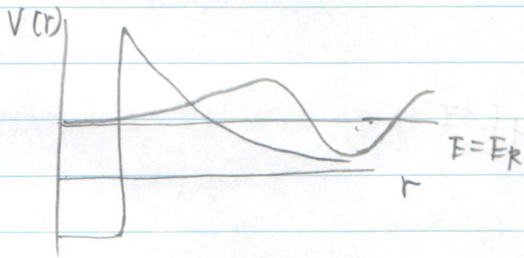


・$\delta_R = \pi/2$ では何が起こっているのか？
再び $\delta_{bg} = 0$ とする。

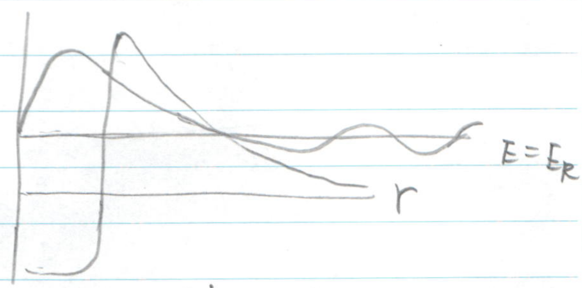
$$u_l(r) \to e^{-i(kr-\frac{l\pi}{2})} - S_l\, e^{i(kr-\frac{l\pi}{2})}$$
$$= (1-S_l)\underbrace{\cos\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)}_{-kr\,n_l(kr)\text{ の漸近形}} - i(1+S_l)\underbrace{\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)}_{kr\,j_l(kr)\text{ の漸近形}}$$

(note) $j_l(x)$ は $x=0$ で正則, $n_l(x)$ は $x=0$ で発散

$\delta_l = 0$ 又は $\delta_l = \pi$ のとき
$S_l = 1$
$\to u_l = -2i\,kr\,j_l(kr)$

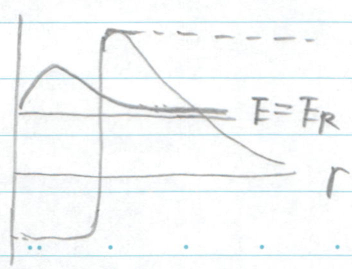


$\delta_l = \pi/2$ のとき $S_l = -1$
$\to u_l(r) = -2kr\,n_l(kr)$

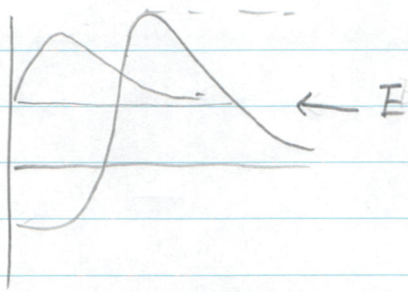


束縛状態のように
振るまう

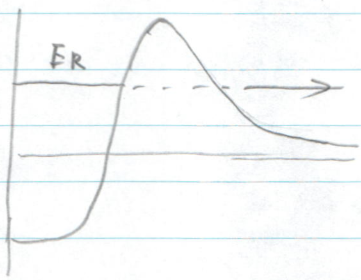
→ 共鳴状態は連続状態に埋めこまれた
束縛状態のようなもの



ポテンシャルを左のように変形
すると束縛状態ができる。



入射 E がこの束縛状態の E に一致すると共鳴



ポテンシャルの内側に波動関数がしばらくトラップされ、やがてトンネル効果で抜けていくピクチャー。

(note) 状態が $E = E_R - i\frac{\Gamma}{2}$ のエネルギー固有値を持つとしたら

$$
\begin{aligned}
P_{sur}(t) &\equiv \left|\langle \psi(0) | \psi(t) \rangle\right|^2 \\
&= \left| \langle \psi(0) | \, e^{-i(E_R - i\frac{\Gamma}{2})t/\hbar} \, | \psi(0) \rangle \right|^2 \\
&= e^{-\Gamma t/\hbar} \cdot \left| \langle \psi(0) | \psi(0) \rangle \right|^2
\end{aligned}
$$

$\updownarrow$ $\tau \equiv \frac{\hbar}{\Gamma}$ = 共鳴状態の寿命.

(note) $E = E_R + i\frac{\Gamma}{2}$ の極は、逆にポテンシャル内側に波動関数が時間とともに入ってくるという状態
→ 物理的な境界条件として適していない。