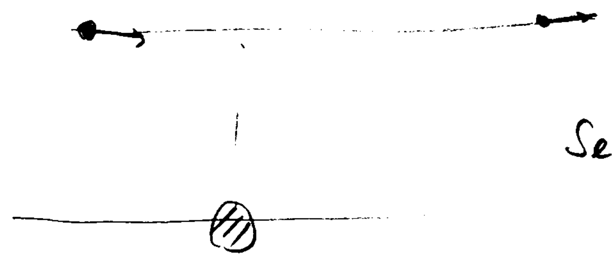
§. クーロン波動関数

クーロンポテンシャル： $V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}$

長距離力 → r がいくら大きくても影響を受ける（波動関数が平面波にならない）



$S_l = 1$ になることはない

↓

$f(\theta) = \sum_l (2l+1) \frac{S_l - 1}{2ik} P_l(\cos\theta)$

は収束しない

→ 別の取扱いが必要

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} - E \right) \psi(r) = 0$$

放物線座標
$$\xi = r(1-\cos\theta) = r - z$$
$$\zeta = r(1+\cos\theta) = r + z$$

を使ってこの方程式を解くと

$$\psi(\xi, \zeta) = C e^{ikz} F(-i\eta, 1, ik\xi)$$

合流超幾何関数

$$\eta = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v}$$ （ゾンマーフェルトパラメータ）

漸近形：

$$\psi(\xi,\zeta) \to \frac{c\, e^{\frac{\eta\pi}{2}}}{\Gamma(1+i\eta)} \left\{ e^{i(kz+\eta \ln(r-z))} + f_c(\theta)\frac{e^{ikr - i\eta \ln 2kr}}{r} \right\}$$

$$\boxed{f_c(\theta) = -\frac{\eta}{2k\sin^2\frac{\theta}{2}}\, e^{-i\eta \ln \sin^2\frac{\theta}{2} + 2i\sigma_0}}$$

$$\sigma_0 = \arg \Gamma(1+i\eta)$$

(note) $\dfrac{d\sigma_c}{d\Omega} = |f_c(\theta)|^2 = \dfrac{\eta^2}{4k^2\sin^4\frac{\theta}{2}} = \left(\dfrac{Z_1Z_2e^2}{4E\sin^2\frac{\theta}{2}}\right)^2$

（ボルン近似で求めたものと一致）

各 l ごとにシュレーディンガー方程式を解くと：

$$\psi_{lm}(\mathbf{r}) = \frac{u_l(r)}{r} Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}})$$

$\downarrow$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{Z_1Z_2e^2}{r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - E\right) u_l(r) = 0$$

解は ホイッタカー関数

線形独立な解

$$u_l(r) = \begin{cases} F_l(kr) \to \sin\left(kr - \eta \ln(2kr) + \sigma_l - \frac{l\pi}{2}\right) \\ G_l(kr) \to \cos\left(kr - \eta \ln(2kr) + \sigma_l - \frac{l\pi}{2}\right) \end{cases}$$

クーロン phase shift： $\sigma_l = \arg \Gamma(l+1+i\eta)$

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

§. WKB近似による散乱問題

1次元のシュレーディンガー方程式

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)+\underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-V(x)\right)}_{\equiv k(x)^2}\psi(x)=0$$

もし $V(x)=\text{const.}$ なら $\psi(x)\propto e^{\pm ikx}$

拡張（WKB近似）

ポテンシャルがゆるやかに変化

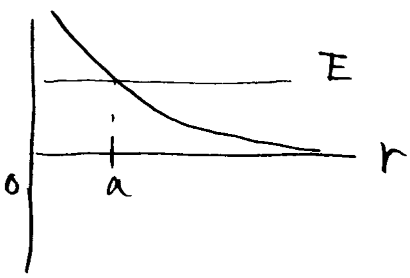
$$\rightarrow \quad \psi(x)\propto\frac{1}{\sqrt{k(x)}}\,e^{\pm i\int^{x}k(x')dx'}$$

• 3次元への拡張

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{u_\ell(r)}{r} Y_{\ell m}(\mathbf{r})$$

$$\rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + \underbrace{\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r)}_{\substack{\shortparallel \\ V_{eff}(r)}} - E \right) u_\ell(r) = 0$$

実質的には一次元と同じ取り扱い



$r > a$ で
$$u_\ell(r) = \frac{C}{\sqrt{k(r)}} \cos\left(\int_a^r k(r')dr' - \frac{\pi}{4}\right)$$
$$= \frac{C}{\sqrt{k(r)}} \sin\left(\int_a^r k(r')dr' + \frac{\pi}{4}\right)$$

$r < a$ で
$$u_\ell(r) = \frac{C}{2\sqrt{\gamma(r)}} e^{-\int_r^a \gamma(r')dr'}$$

(note) $r \sim 0$ で

$$\gamma(r) = \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) - E\right)} \sim \frac{\sqrt{\ell(\ell+1)}}{r}$$

$\downarrow$

$$u_\ell(r) \sim \sqrt{r}\, e^{\sqrt{\ell(\ell+1)} \ln r} = r^{\sqrt{\ell(\ell+1)} + \frac{1}{2}}$$

exact な解は $u_\ell(r) \sim r^{\ell+1}$

→ ランガーの補正 $\ell(\ell+1) \to (\ell+\frac{1}{2})^2$

(数学上は $r = e^\xi$, $u_\ell(r) = g(\xi)\, e^{\xi/2}$
という変換をして $g(\xi)$ に対して WKB 近似
を使うとこの補正がでてくる。)

■ WKB 位相差

$$u_\ell(r) = \frac{C}{\sqrt{k(x)}} \sin\Big(\underbrace{\int_a^r k(r')dr'}_{\textstyle \parallel} + \frac{\pi}{4} \Big)$$

$$\int_a^r (k(r') - k)dr' + kr - ka$$

$$\longleftrightarrow \quad \frac{C}{\sqrt{k}} \sin\Big(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell\Big)$$

↓

$$\delta_\ell = \int_a^\infty (k(r) - k)dr - ka + \frac{\pi}{2}\big(\underbrace{\ell + \tfrac{1}{2}}_{\text{ランガー}}\big)$$

ポテンシャルがないとき：

$$\frac{(l+\frac{1}{2})^2\hbar^2}{2\mu a_0^2} = E = \frac{k^2\hbar^2}{2\mu}$$

$$\int_{a_0}^{r} k_0(r')\,dr' = \int_{(l+\frac{1}{2})/k}^{r} \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E-\frac{(l+\frac{1}{2})^2\hbar^2}{2\mu r'^2}\right)}\,dr'$$

$$= \int_{l+\frac{1}{2}}^{kr} \sqrt{1-\frac{(l+\frac{1}{2})^2}{k^2 r'^2}}\,d(kr')$$

$$= \sqrt{(kr)^2-(l+\tfrac{1}{2})^2} + (l+\tfrac{1}{2})\sin^{-1}\frac{l+\frac{1}{2}}{kr} - (l+\tfrac{1}{2})\cdot\frac{\pi}{2}$$

$$\int dx\,\frac{\sqrt{x^2-\alpha^2}}{x} = \sqrt{x^2-\alpha^2}+\alpha\left|\sin^{-1}\frac{\alpha}{x}\right|$$

$$\to kr - (l+\tfrac{1}{2})\cdot\frac{\pi}{2} \qquad (r\to\infty)$$

↓

$$\delta_l = \lim_{r\to\infty}\left[\int_a^r k(r')\,dr' - \int_{a_0}^r k_0(r')\,dr'\right]$$

§. Klein-Gordon 方程式

(復習) $$E = \frac{\mathbb{P}^2}{2m} + V(\mathbb{r})$$

$$E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \quad \mathbb{P} \to \frac{\hbar}{i}\nabla$$

$$\downarrow \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbb{r})\right)\psi$$

相対論では： $E^2 = m^2c^4 + \mathbb{P}^2c^2$

$$\downarrow \quad -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi = (m^2c^4 - \hbar^2c^2\nabla^2)\psi$$

or $$\left(-\frac{\partial^2}{\partial(ct)^2} + \nabla^2\right)\psi = \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\psi$$

$$\Box \equiv \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2$$ (ダランベルシアン)

$$\downarrow \quad \boxed{\left(\Box + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right)\phi = 0}$$ クライン・ゴルドン方程式

(note) $$x^\mu = (ct, \mathbb{r})$$
$$x_\mu = (ct, -\mathbb{r})$$

$$p^\mu = i\hbar\frac{\partial}{\partial x_\mu} = i\hbar\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, -\nabla\right) \equiv i\hbar\partial^\mu$$

$$p_\mu = i\hbar\frac{\partial}{\partial x^\mu} = i\hbar\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, \nabla\right) \equiv i\hbar\partial_\mu$$

$$\downarrow \quad \Box \equiv \partial^\mu\partial_\mu$$

・Klein-Gordon方程式の問題点：確率解釈

$$\begin{cases} \left(\Box + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right)\phi = 0 \\ \left(\Box + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right)\phi^* = 0 \end{cases}$$

$\downarrow$

$$\phi^*\left(\Box + \cancel{\left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2}\right)\phi - \phi\left(\Box + \cancel{\left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2}\right)\phi^* = 0$$

$$\rightarrow \quad \partial^\mu \underbrace{\left(\phi^* \partial_\mu \phi - \phi\, \partial_\mu \phi^*\right)}_{\displaystyle \parallel \atop \displaystyle \frac{2m}{i\hbar} j_\mu} = 0$$

$\frac{2m}{i\hbar} j_\mu$ とすると $\partial^\mu j_\mu = 0$ であるが、

$$\rho \equiv \frac{1}{c} j_0 = \frac{i\hbar}{2mc^2}\left(\phi^* \frac{\partial}{\partial t}\phi - \phi \frac{\partial}{\partial t}\phi^*\right)$$

は負になる場合がある。→ 確率密度とは解釈できない。

(note) 非相対論

$$\rho = |\psi|^2, \quad \boldsymbol{j} = \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*\right)$$

として

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \nabla \cdot \boldsymbol{j} = 0$$

$\rho = |\psi|^2$ は必ず正

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

§. Dirac 方程式

KG 方程式の困難：t に関して 2階

→ t に関して 1階の方程式を作りたい。

→ 相対論的共変性（ローレンツ変換に対する共変性）から空間に対しても 1階

∴
$$\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} + \vec{\alpha}\cdot\vec{\nabla} + i\beta\frac{mc}{\hbar}\right)\psi(x) = 0$$
を仮定

（$\vec{\alpha}$, β は x に依らない）

この方程式の解が KG 方程式の解になっていれば $E^2 = m^2c^4 + p^2c^2$ が満たされることになる。

$$\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right)\psi = 0$$

∴
$$\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \left(\frac{mc}{\hbar^2}\right)^2\right) = \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} - \vec{\alpha}\cdot\vec{\nabla} - i\beta\frac{mc}{\hbar}\right) \times \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} + \vec{\alpha}\cdot\vec{\nabla} + i\beta\frac{mc}{\hbar}\right)$$

となっていればよい。

$$\left(\frac{1}{c}\partial_t - \alpha_i\partial_i - i\beta\frac{mc}{\hbar}\right)\left(\frac{1}{c}\partial_t + \alpha_j\partial_j + i\beta\frac{mc}{\hbar}\right)$$
$$= \frac{1}{c^2}(\partial_t)^2 \underbrace{- \alpha_i\alpha_j\partial_i\partial_j} \underbrace{- i\alpha_i\beta\,\partial_i\frac{mc}{\hbar} - i\beta\alpha_j\frac{mc}{\hbar}\partial_j} \underbrace{+ \beta^2\left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2}$$

∴
$$\boxed{\beta^2 = 1, \quad \alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i = 2\delta_{i,j}, \quad \alpha_i\beta + \beta\alpha_i = 0}$$

→ α_i, β は行列。波動関数 ψ もベクトル（多成分）

$(\alpha_i)^2 = 1, \quad \beta^2 = 1$ → それぞれの行列の固有値は±1.

(note)

$$\alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0$$

$$\rightarrow \underbrace{\alpha_i^2 \beta}_{= \beta} + \alpha_i \beta \alpha_i = 0$$

$$\beta \alpha_i \beta + \underbrace{\beta^2 \alpha_i}_{= \alpha_i} = 0$$

$$\Downarrow \quad \mathrm{Tr}(\alpha_i) = -\mathrm{Tr}(\beta \alpha_i \beta) = -\mathrm{Tr}(\beta^2 \alpha_i) = -\mathrm{Tr}(\alpha_i)$$

$$\Downarrow \quad \mathrm{Tr}(\alpha_i) = 0$$

同様に $\mathrm{Tr}(\beta) = 0$

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

α_i, β の固有値は ±1 なので成分の数は偶数に限る

2×2 エルミート行列で反可換で独立な行列

→ パウリ行列 σ_i の 3 つだけ

→ いまは α_i, β の 4 つ必要なので
この可能性は排除.

→ 4×4 行列が最小元の行列.

$\beta^2 = 1, \quad \alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i = 2\delta_{i,j}, \quad \alpha_i\beta + \beta\alpha_i = 0$

を満たすものの例として

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

がある(ディラック表示)。

(note) $\alpha_i\beta + \beta\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}$

$$= \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix} = 0$$

$$\alpha_i\alpha_j = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ \sigma_j & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_i\sigma_j & 0 \\ 0 & \sigma_i\sigma_j \end{pmatrix}$$

$$\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i = 2\delta_{i,j}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \leftarrow \quad \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\delta_{ij}$$

これより

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = (-i\hbar c\vec{\alpha}\cdot\vec{\nabla} + \beta mc^2)\psi}$$

Dirac方程式

$$= H\psi$$

$$H = -i\hbar c\vec{\alpha}\cdot\vec{\nabla} + \beta mc^2 = c\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta mc^2$$