Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan

復習： $\psi(r) \to e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}$

$\hookrightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$

2.4 部分波解析

ボルン近似 $E \gg |V(r)| \to$ 摂動論

$$\psi_i(\vec{r}) = e^{i\vec{p}_i\cdot\vec{r}/\hbar} \xrightarrow[\uparrow\, V(r)]{} \psi_f(\vec{r}) = e^{i\vec{p}_f\cdot\vec{r}/\hbar}$$

(note) $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = e^{ikr\cos\theta}$

$$= \sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\, i^\ell\, \underbrace{j_\ell(kr)}_{\text{球ベッセル関数}}\, P_\ell(\cos\theta)$$

ルジャンドル多項式で展開

ℓ：部分波

(note) ルジャンドル多項式

$$\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} = \frac{1}{(r^2+r'^2-2rr'\cos\theta)^{1/2}} = \sum_{\ell=0}^{\infty}\frac{r_<^\ell}{r_>^{\ell+1}}P_\ell(\cos\theta)$$

$$\int_{-1}^{1} P_\ell(x)P_{\ell'}(x)\,dx = \frac{2}{2\ell+1}\delta_{\ell,\ell'}$$

$$P_\ell(x) = \begin{cases} 1 & (\ell=0) \\ x & (\ell=1) \\ \frac{1}{2}(3x^2-1) & (\ell=2) \\ \vdots & \end{cases}$$

$$P_\ell(x) \propto x^\ell - \sum_{\ell'=0}^{\ell-1}\frac{2\ell'+1}{2}\left[\int_{-1}^{1}dx'\,(x')^\ell P_{\ell'}(x')\right] \times P_{\ell'}(x)$$

(note) 球ベッセル関数

$$\left[\frac{d^2y}{dx^2}+\frac{2}{x}\frac{dy}{dx}+\left(1-\frac{l(l+1)}{x^2}\right)y\right]=0$$

$$y=\begin{cases} j_l(x) & \text{球ベッセル関数} \\ n_l(x) & \text{球ノイマン関数} \end{cases}$$

$x\to 0$ で

$$j_l(x)\sim\frac{x^l}{(2l+1)!!}$$

$$n_l(x)\sim-\frac{(2l-1)!!}{x^{l+1}}$$ ← 原点で発散

$x\to\infty$ で

$$j_l(x)\sim\frac{1}{x}\sin\left(x-\frac{l\pi}{2}\right)$$

$$n_l(x)\sim-\frac{1}{x}\cos\left(x-\frac{l\pi}{2}\right)$$

・中心力ポテンシャルの問題

$$\Psi_l(\mathbf{r})=R_l(r)\,Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}})$$

↓

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)R_l(r)+\left(V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}-E\right)R_l=0$$

$V(r)=0$ のとき

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)R_l(r)+\left(\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}-\underset{\frac{k^2\hbar^2}{2m}}{\overset{\text{|||}}{E}}\right)R_l(r)=0$$

↓

$$-\left(\frac{d^2}{d(kr)^2}+\frac{2}{kr}\frac{d}{d(kr)}\right)R_l(r)+\left(\frac{l(l+1)}{(kr)^2}-1\right)R_l(r)=0$$

↓

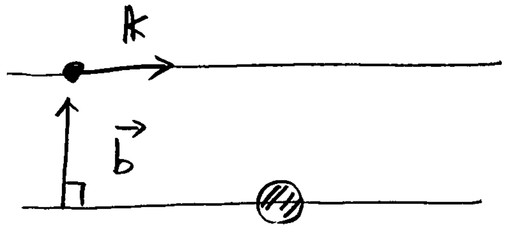
$$R_l(r)=j_l(kr)\quad\text{or}\quad n_l(kr)$$

Department of Physics
Tohoku University
Sendai Japan

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\, i^{l}\, j_l(kr)\, P_l(\cos\theta)$$

↳ 平面波 $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ には全ての部分波 l が
まざっている

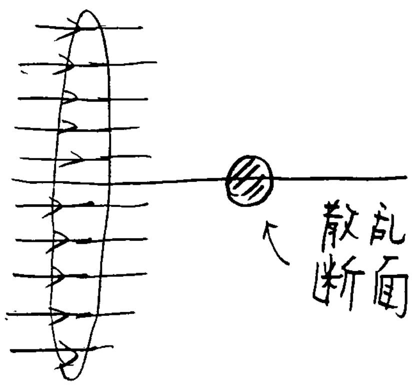
(note) 衝突係数 (impact parameter)



$$\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p} \quad \longrightarrow \quad l = b k \hbar$$

衝突係数

$\sum_{l=0}^{\infty} \cdots$ ↔ いろいろな衝突係数が合わさっている



散乱断面積：微視的な量

ビームの大きさ → 巨視的な量

↝ エネルギーが低くなると各 l ごとに考える
必要がある（部分波解析）

Department of Physics
Tohoku University
Sendai

・部分波解析

自由粒子： $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = E\psi = \frac{k^2\hbar^2}{2m}\psi$

↓

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = e^{ikr\cos\theta}$$

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

$$\hookrightarrow \frac{1}{kr}\sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right) \qquad (r\to\infty)$$

$$\to \frac{i}{2k}\sum_\ell (2\ell+1)\, i^\ell \left[e^{-i(kr-\frac{\ell\pi}{2})} - e^{+i(kr-\frac{\ell\pi}{2})}\right] \times P_\ell(\cos\theta)\cdot\frac{1}{r}$$

ポテンシャルがある場合：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) - E\right]\psi(\mathbf{r}) = 0$$

$V(r)\to 0 \quad (r\to\infty)$ 　このとき $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - E\right)\psi = 0$

↓ 波動関数の漸近形 (asymptotic form) は自由粒子の場合と同様

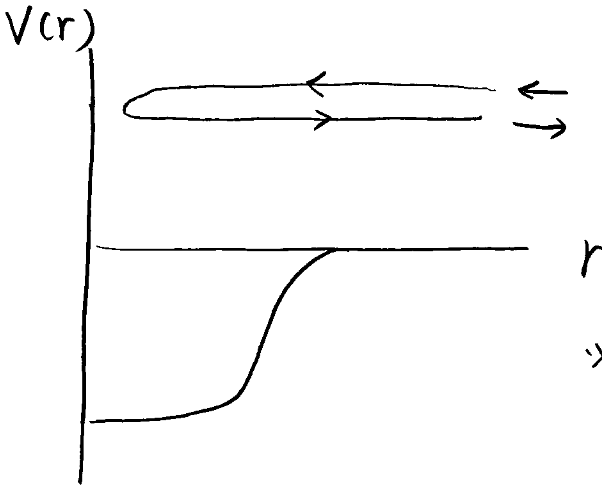
$$\psi(\mathbf{r}) \to \frac{i}{2kr}\sum_\ell (2\ell+1)\, i^\ell \left[e^{-i(kr-\frac{\ell\pi}{2})} - \underline{S_\ell}\, e^{+i(kr-\frac{\ell\pi}{2})}\right] \times P_\ell(\cos\theta)$$

S 行列

↑

ポテンシャルの効果を反映させる

Department of Physics
Tohoku University
Sendai Japan



e^{-ikr} （内向波）

$s \cdot e^{ikr}$ （外向波）

※弾性散乱のみを考える場合は $|S_l| = 1$
（フラックスの保存）
↳ $S_l = e^{2i\delta_l}$ （δ_l：位相のずれ）

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

$$= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \underbrace{\left[\sum_l (2l+1) \frac{S_l - 1}{2ik} P_l(\cos\theta) \right]}_{= f(\theta)} \cdot \frac{e^{ikr}}{r}$$

$$i^l e^{-i\frac{l\pi}{2}} = i^l \cdot (-i)^l = 1$$

$$= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(\theta) \cdot \frac{e^{ikr}}{r}$$

散乱断面積： $\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$

Department of Physics
Tohoku University
Sendai Japan

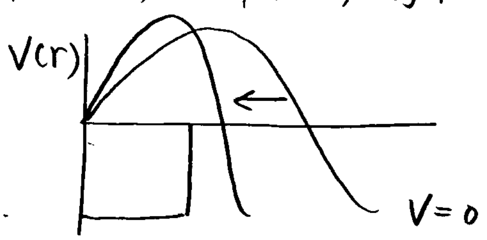
(note) 位相のずれの意味：

$$u_\ell(r) \rightarrow e^{-i(kr-\frac{\ell\pi}{2})} - \underbrace{S_\ell}_{= e^{2i\delta_\ell}} e^{+i(kr-\frac{\ell\pi}{2})}$$

$$= e^{i\delta_\ell}\left[e^{-i(kr-\frac{\ell\pi}{2}+\delta_\ell)} - e^{i(kr-\frac{\ell\pi}{2}+\delta_\ell)} \right]$$

$$= -2i\, e^{i\delta_\ell} \cdot \sin(kr - \frac{\ell\pi}{2} \underbrace{+\delta_\ell}_{\text{位相が}\delta_\ell\text{だけずれる}})$$

引力ポテンシャルの場合

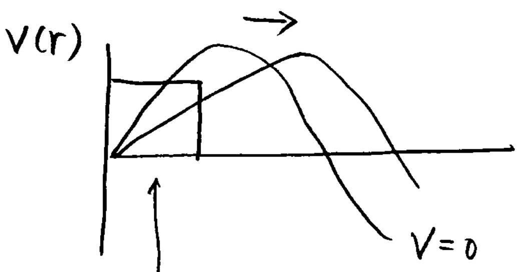


$$\tilde{k} \equiv \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(r))} > \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}$$

$$\rightarrow \delta_\ell > 0$$

$$\sin(\tilde{k}r) = \sin(kr+\delta)$$

斥力ポテンシャルの場合



$$\tilde{k} \equiv \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(r))} < \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}$$

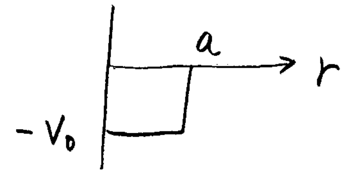
$$\rightarrow \delta_\ell < 0$$

$$\sin(\tilde{k}r) = \sin(kr-\delta)$$

Department of Physics
Tohoku University
Sendai Japan

○ 球対称井戸型ポテンシャル $(E > 0)$

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



$r < a$ では

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} - \underbrace{(E + V_0)}_{\equiv\, \frac{\tilde{k}^2\hbar^2}{2m}} \right] R_l(r) = 0$$

$$\downarrow \qquad R_l(r) = A\, j_l(\tilde{k} r)$$

$r > a$ では 自由粒子と同じ

$$R_l(r) = B\, j_l(kr) + C\, n_l(kr)$$

係数 A, B, C は $r = a$ での波動関数の接続によって求まる

$$R_l(a_<) = R_l(a_>)$$
$$R_l'(a_<) = R_l'(a_>)$$

Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan

(note) $r \gg a$ での振るまい

$$R_\ell(r) \sim B \cdot \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right) - C \frac{1}{kr} \cos\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right)$$

$$= \frac{1}{kr}\left[\left(\frac{B}{2i} - \frac{C}{2}\right) e^{i(kr - \frac{\ell\pi}{2})} - \left(\frac{B}{2i} + \frac{C}{2}\right) e^{-i(kr - \frac{\ell\pi}{2})}\right]$$

$$= -\frac{1}{kr}\left(\frac{B}{2i} + \frac{C}{2}\right)\left[e^{-i(kr - \frac{\ell\pi}{2})} - \underbrace{\frac{\frac{B}{2i} - \frac{C}{2}}{\frac{B}{2i} + \frac{C}{2}}}_{\equiv S_\ell} e^{i(kr - \frac{\ell\pi}{2})}\right]$$

$$S_\ell = \frac{B - iC}{B + iC} \qquad (S\text{-行列})$$

(note) $|S_\ell|^2 = \frac{B - iC}{B + iC} \cdot \frac{B + iC}{B - iC} = 1.$

(B, C が実数の場合)

$\Updownarrow$

フラックスの保存

$\downarrow$ $S_\ell = e^{2i\delta_\ell}$ δ_ℓ：位相のずれ

$\downarrow$ $R_\ell(r) \sim e^{i\delta_\ell} \cdot \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell\right)$

V_ℓ：引力 $\rightarrow$ $\delta_\ell > 0$ 波動関数は内側に
斥力 $\rightarrow$ $\delta_\ell < 0$ 外側