

Sec.5 – Interactions between atoms

Sho IWAMOTO [ID:61508] (Dept. of Physics : 3rd yr.)

January 30, 2007

■希薄気体中の原子の衝突

- 原子間隔 $10^2 \text{ nm} > \text{散乱長 } a \sim 10 \text{ nm}$ ゆえ、低 energy での 2 体散乱で解析可能。
- ただし、弾性散乱のみでなく、
 - ・ 非弾性散乱^{*1} → Trapped atom の損失
 - ・ Feshbach resonance^{*2} → 実効原子間相互作用の大きさや符号の操作のような内容が絡んでくるみたい。

【備考】 Photoassociation spectroscopy と Feshbach resonance は散乱長を調べるのに役に立ったらしい。

本章で扱う内容

- §5.1 : Alkali 原子の散乱長がとても長いことを次元解析で示す。
- §5.2 : 散乱の復習 : 単一 channel に対する散乱 (弾性散乱)
- §5.3 : 散乱長の話 (剛体 model と van der Waals $\propto r^{-6}$)
- §5.4 : 非弾性散乱と Feshbach resonance
- §5.5 : [おまけ] 実験手法とか

5.1 INTERATOMIC POTENTIALS AND THE VAN DER WAALS INTERACTION

【注意】 本節で扱う van der Waals 相互作用は、いわゆる分子間の van der Waals 力とは若干異なる。敢えて物性化学的な言い方をすると、分散力 (London force) を原子について考えた結果である。

Fig.5.1 に示してあるのは、singlet と triplet の時の相互作用 potential であり、これは殆ど共有結合的な効果である。勿論 singlet の方が triplet よりも強い結合を受けるが、3 重項の potential も多くの束縛状態を持つ深さであり、van der Waals 相互作用よりはかなり強いと言える。

Rb の共有結合半径は $221 \text{ pm} = 4.2a_0$ 、van der Waals 半径は $244 \text{ pm}(?) = 4.6a_0$ である [1]^a が、結合は fig.5.1 で分かるとおりとても共有結合的であるので、van der Waals 半径はこの話とは殆ど関係ない。

^a VdW 半径の wikipedia における出典は不明。

*1 散乱前後で channel(量子状態) が変化する。

*2 Text には “あるチャンネルの束縛状態が他の channel に影響を与える現象で、channel 間の結合に起因する” と書いているけど……。

■次元解析による散乱長の見積もり

低 energy の 2 体相互作用は散乱長で特徴付けられる。(詳細は Sec.5.3 で扱うつもりでいます。扱いたくないケド。) そこで、本節では散乱長の大きさを見積もる。^{*3}

Van der Waals 相互作用下の原子 (質量 m) について、原子間に特徴的な長さ r_0 を用いて、van der waals 引力と運動 energy を等しいとすると

$$\frac{\hbar^2}{2mr_0^2} \sim \frac{\alpha}{r_0^6}$$

である。ここで α を、原子に特徴的な長さ a_0 と energy e_0^2/a_0 を用いて

$$\alpha = C_6 a_0^6 \frac{e_0^2}{a_0}$$

とおく。更に、電子について運動 energy を

$$\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \cdot \frac{e_0^2}{a_0}$$

と“次元解析により”見積もれば式 (5.1) となる。^{*4}

実際に計算してみると、例えば ^{133}Cs ($C_6 = 6890$) の場合は $r_0 \approx 200a_0$ となる。

◆ Magnitude of the van der Waals interaction

式 (5.3) で与えられる U_{ed} を用いて、基底状態に対する摂動を考える。なお、式 (5.3) の導出は付録 A.1 を参照して欲しい。幸いにして基底状態は縮退していないので、摂動の公式

$$\begin{aligned} \Delta E^{(1)} &= \langle 0 | U_{\text{ed}} | 0 \rangle \\ \Delta E^{(2)} &= \sum_{N \in \text{励起状態}} \frac{|\langle N | U_{\text{ed}} | 0 \rangle|^2}{E_0 - E_N} \end{aligned}$$

を速やかに用いることが出来る。但しここで bra・ket・energy 固有値は 2 粒子の状態を指定していることに注意。そしていつものように $\langle 0 | d_1 | 0 \rangle = 0$ 等^{*5}より、 $\Delta E^{(1)} = 0$ となる。

$\Delta E^{(2)}$ については若干複雑であるため、付録 A.2 に記した。

■近似値と厳密値とのずれ

ところで、式 (5.6) は相変わらず

$E_n - E_0$ が大きいから価電子以外の寄与は無視できる、という大胆な近似をした上で、更に resonance line として現れる遷移 (nP から nS への主要な遷移) 以外の遷移は全て無視できるという更なる大胆な近似

を用いたわけなので、相変わらず

軽い原子 ... resonance line 以外の寄与 (第 2 の近似の破綻)
(ΔE 大きい 理論値を押し下げる)
重い原子 ... 内殻電子による寄与 (第 1 の近似の破綻)
(ΔE 小さい 理論値を押し上げる)

Element	(5.6)	Tab.5.1
H-H	14.2	6.5
Li-Li	2396	1393
Na-Na	1623	1556
K-K	3578	3897
Rb-Rb	3824	4691
Cs-Cs	5153	6851

により、軽い原子では実際より大きく、重い原子では実際より小さい結果が返されるわけである。

ちなみに Rb については実験値として $C_6 = 4707$ が得られている [2]。

^{*3} Text には “We first give dimensional arguments” とあるが、僕にはどうしてもこの方法が次元解析だとは思えない。

^{*4} 実際には、最後の見積もりは数十倍ズレがある。第 (-1) 次近似と言えよう。

^{*5} 厳密に書けば $(\langle 0 | \otimes \langle 0 |)(d_1 \otimes 1)(|0 \rangle \otimes |0 \rangle) = 0$ となる。

■相互作用の遅延効果

電磁気力は光速で伝わるから r が大きいと到達するのが遅くなる 実際より遠くに見える 力は r が大きいほど弱くなる 次数をもう1つ下げちゃおう, ってわけ?? 大変ね。

ちなみに波長 $10^3 a_0 \simeq 50 \text{ nm}$ は遠紫外線みたい。25 eV ぐらいらしい。

5.2 BASIC SCATTERING THEORY

本節では、内部自由度を持たない(弾性散乱)で、さらに potential が球対称である場合を取り扱う。

■散乱の基礎

まず、2 粒子は区別可能とすると、全体の波動関数は

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{V}} [e^{ikz} + \phi_{\text{sc}}(\mathbf{r})] \quad (5.7)$$

$$\sim \frac{1}{\sqrt{V}} \left[e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right] \quad (r \rightarrow \text{大}) \quad (5.8)$$

となる。^{*6}

s 波のみからなる波動関数を、 $V(r) = 0$ の領域(外部)で $\psi = Av(r)$ と書くと、この式は

$$v(r) = \frac{\sin(kr + \delta_0)}{r}$$

となるゆえ

$$v(r) = \frac{\sin kr \cos \delta_0 + \cos kr \sin \delta_0}{r} \simeq k \cos \delta_0 + \frac{\sin \delta_0}{r}$$

となり、適当に規格化すると

$$v(r) = 1 + \frac{1}{k} \frac{\tan \delta_0}{r} \quad (5.10)$$

となる。 $(\delta_0 < 0$ に注意)^{*7}

■部分波展開による処理

Potential が球対称であるとき、Hamiltonian H は軌道角運動量演算子 L, L_z と交換する。^{*8}このとき定常状態の波動関数 (energy: E) は

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \sum_{l,m} A_{Elm} \cdot R_{El}(r) Y_l^m(\theta, \phi) \\ &= \sum_{l,m} A_{Elm} \cdot R_{El}(r) N_{lm} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi} \end{aligned}$$

のように展開することができる。[3, §5.4] ただしここで、球面調和関数は規格化定数 N_{lm} を用いて $Y_l^m = N_{lm} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}$ と表せることを用いた。^{*9}

^{*6} 波数 k と換算質量 m_r はいつも通り。もちろん $f(\theta)$ は散乱振幅で、微分散乱断面積 $\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) = |f(\theta)|^2$ 。

^{*7} ってことで $k \cot \delta_0 \sim -1/a$ も示せたわけで。

^{*8} あるいは“軌道角運動量 L, L_z は保存量となる”, とも言えるが、これは古典な考察 “ $\mathbf{x} \times \mathbf{p}, x p_y - y p_x$ は保存量となる” から導き出すことも出来る。

^{*9} $N_{lm} = \epsilon \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}$ (ϵ は $m \leq 0$ のとき 1, $m > 0$ のとき $(-1)^m$)

ところが、入射波の方向を z 軸にとると、系は ϕ に依存しないので、 $m = 0$ の場合のみが許されることになる。^{*10}ゆえに

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_l A_{El} N_l \cdot R_{El}(r) P_l(\cos \theta) \quad (5.12)$$

となる。

さて、この $R_{kl}(r)$ は、Bessel 関数と Neumann 関数を用いて、あるいは位相のずれ δ_l を用いて

$$\begin{aligned} R_{El}(r) &= A j_l(kr) + B n_l(kr) \quad (V(r) = 0 \text{ の領域で}) \\ &\sim \frac{C}{r} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) \quad (r \rightarrow \text{大}) \end{aligned}$$

と表すことができ、この δ_l を用いれば (5.15) 式が得られる。(導出は付録 B) および [3, §12.5]などを参照。) ここから (5.17) 式を導出するには、 $d\Omega = 2\pi d(\cos \theta)$ および

$$\int_{-1}^1 P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) d(\cos \theta) = \frac{2}{2l+1} \delta_{l,l'} \quad (5.13)$$

を用いれば極めて易しい。

■ s 波散乱

以下のことは示すべきことである：

- 有限の到達範囲を持つ potential での散乱では、小さな k に対し $\delta_l \propto k^{2l+1}$
- r^{-n} 型なら $l < (n-3)/2$ に対し $\delta_l \propto k^{2l+1}$ 、大きな l では $\propto k^{n-2}$

まず、よく知られているように、部分波 $R_l(r)$ は Schrödinger 方程式

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m_r}{\hbar^2} V(r) + k^2 \right] [rR_l(r)] = 0$$

を満たす。

ここで、有限 potential の場合はその範囲外の領域で $V(r) = 0$ であるが、そのような領域下で成り立つ式

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right] [krj_l(kr)] = 0$$

を用いれば速やかに、 $\sin \delta_l$ の漸近形

$$k \sin \delta_l \sim -\frac{2m_r}{\hbar^2} \int_0^\infty V(r) [rR_l(r)] [krj_l(kr)] r^2 dr$$

が得られる [3, §12.6]。(位相のずれに対する Born 近似)

更に V が十分小さいとすれば $R_l \sim k j_l(kr)$ とでき、更に $kr \ll 1$ では $j_l(kr)$ の漸近形が k^l に比例することから、 $\delta_l \propto k^{2l+1}$ が示される。

ただ、ここで最後の V を小さくする近似が気に入らない。任意の有限 potential でこのようなことは言えるのだろうか?

まあ、剛体球 potential $V(r) = \infty (r < a)$ で成立している [3, P.448] から良いのかも知れないが.....。

また、 r^{-n} 型については、文献 [5] にそれらしいことが書いてあったが、 $(n-3)/2$ などの条件は書かれておらず、他の文献にも載っていなかった。

^{*10} 数学的な証明は [4, §7.6] を見よ。(やや難しい。)

まあともかく、それが成り立つなら、十分 k が小さければ $l = 0$ しか考えなくて良い、というのは分かる。(多分 $n = 1, 2$ が長距離とか Coulomb とか特殊に扱われるのはこのようなことによるのだろう。)

このとき

$$\psi(\mathbf{r}) = AR_0(r)$$

$$R_0(r) = Aj_0(kr) + Bn_0(kr) = \frac{A \sin kr - B \cos kr}{kr} \quad (5.18)$$

$$\therefore \delta_0 = \arctan\left(-\frac{B}{A}\right) \simeq -\frac{B}{A} \quad (\because A \gg B) \quad (5.19)$$

$$\text{或いは } k \cot \delta_0 = -1/a \text{ より } \delta_0 \simeq -ka \quad (5.20)$$

$$f(\theta) = \frac{1}{k} e^{i\delta_0} \sin \delta_0 (\text{定義}) \simeq -a$$

のような近似式が成り立つ。

■同種粒子の散乱

ここで 2 粒子の識別可能性の仮定を外す。

式 (5.8) に $r \rightarrow -r$ の変換を施すと

$$\bar{\psi} \sim \frac{1}{\sqrt{V}} \left[e^{-ikz} + f(\pi - \theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right]$$

となるので、質量 m の同種 2 粒子 (換算質量 $m_r = m/2$) の波動関数は boson および fermion について

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{V}} \left\{ e^{ikz} \pm e^{-ikz} + [f(\theta) \pm f(\pi - \theta)] \frac{e^{ikr}}{r} \right\} \quad (5.23)$$

となる。^{*11} これを用いて微分散乱断面積を導出すると (詳細は付録 C を参照)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) = |f(\theta) \pm f(\pi - \theta)|^2 \quad (5.24)$$

が得られる。

ところが (5.24) の左辺は粒子 2 個分であるので、全立体角について積分すると本来の微分散乱断面積の 2 倍になるはずである。よって、全立体角で積分して 2 で割ればよい。実際に、 $f(\theta) = -a$ とすると

$$\sigma = \begin{cases} 8\pi a^2 & (\text{Boson}) \\ 0 & (\text{Fermion}) \end{cases}$$

となる。特に Boson の場合は 2 で割った後も元の立体角の 2 倍になっている。

これはどういう物理なのだろうか? Boson が干渉して振幅が 2 倍になったから強度が 4 倍になった?

^{*11} 規格化因子が変わらないことに注意。2 体の波動関数を考えている。

◆ 5.2.1 Effective interaction and the scattering length

原子が短距離に近づいてしまうと計算がめんどくさいので, *effective interaction* とやらを導入するといひ。
This describes interactions among long-wavelength, low-frequency degrees of freedom via interactions with those at shorter wavelengths has been taken into account.

■運動量表示

これを定量的に考えるため, 2 体衝突を運動量表示で考える。

波動関数の運動量表示が

$$\psi(\mathbf{k}') = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) + \psi_{\text{sc}}(\mathbf{k}') \quad (5.26)$$

となるのは当たり前であり, また Schrödinger 方程式は

$$\frac{\mathbf{p}^2}{m} |\psi\rangle + U|\psi\rangle = E|\psi\rangle \iff \langle \mathbf{k}' | \left(E - \frac{\mathbf{p}^2}{m} \right) |\psi\rangle = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}''} \langle \mathbf{k}' | U | \mathbf{k}'' \rangle \langle \mathbf{k}'' | \psi \rangle$$

に (5.26) を代入すれば*12

$$\left(\frac{\hbar^2 k'^2}{m} - \frac{\hbar^2 k'^2}{m} \right) \psi_{\text{sc}}(\mathbf{k}') = (2\pi)^3 \langle \mathbf{k}' | U | \mathbf{k} \rangle + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}''} \langle \mathbf{k}' | U | \mathbf{k}'' \rangle \psi_{\text{sc}}(\mathbf{k}'') \quad (5.27)$$

となる。あれ? $(2\pi)^3$ が残った.....。

■遷移演算子 T

遷移演算子 T は,

$$U|\psi_{\text{sc}}\rangle = T|\psi_{\text{in}}\rangle$$

のように定義される演算子である。Lippmann-Schwinger 方程式

$$|\psi^{(+)}\rangle = |\psi_0\rangle + \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V |\psi^{(+)}\rangle$$

の両辺に U をかけることで, 速やかに

$$T|\psi_{\text{in}}\rangle = U|\psi_{\text{in}}\rangle + U \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} T|\psi_{\text{in}}\rangle$$

が得られる。これに $\frac{1}{V} \sum$ を作用させたものが (5.30) 式である。

なお, 教科書では T -matrix は

$$T(\mathbf{k}', \mathbf{k}, E) = \langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle \quad \left(= \langle \mathbf{k}' | T | \psi_{\text{in}} \rangle \right)$$

のように定義されていることに注意。すると式 (5.29) は

$$|\psi_{\text{sc}}\rangle = \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} T |\psi_{\text{in}}\rangle \iff (E - H_0) |\psi_{\text{sc}}\rangle = U |\psi_{\text{sc}}\rangle$$

というだけの式であることがわかるだろう。

*12 ここで V は $(2\pi)^3$ と同様に, (相空間の) 体積であることに注意。

平面波が delta 関数になるというよりは、そもそも平面波というのが運動量の固有 ket $|k\rangle$ であると言った方がよい。この ket を、 $\langle k'|$ で表示すると delta 関数になるのは当然である。ところで、となると e^{ikz} は座標表示したもの、つまり $\langle x|k\rangle$ となるわけだが、任意の関数 $\psi(x)$ を $\psi(k)$ にする変換、即ち Fourier 変換が

$$\psi(k) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

即ち

$$\langle k|\psi\rangle = \int d\mathbf{x} \langle k|\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}|\psi\rangle$$

であることを考えると、色々な bra-ket 代数が当然に思えてくる。

そして、(5.29) に左から $(2\pi)^{-3} \int \langle \mathbf{x}|\mathbf{k}'\rangle$ を作用させると、(5.32) 以下の式が導かれる。

ちなみに、(5.35) 式は散乱振幅の式 [3, Eq.12.34]

$$f(\theta) = -\frac{m_r}{2\pi\hbar^2} \int d\mathbf{x}' e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}'} U(\mathbf{x}') \psi_{sc}(\mathbf{x}')$$

を変形しただけの式である。

■Born 近似

よく見る Born 近似は、このすぐ上の $f(\theta)$ の式の左辺の ψ_{sc} を ψ_{in} で近似するものであるが、それはつまり $T \sim U$ としたことになるわけで、ゆえに (5.36) 式が導かれる。

■別の視点から見る

式 (5.30) を分解して、 k'' の小さな部分 ($k'' < k_c$) を無視した遷移演算子 \tilde{U} を導入する。

この k'' というのは、いわゆる中間状態の energy であり、つまり中間状態の energy が低いような遷移の寄与を無視している。この辺りの議論がよく解りませんでした。多分この節の冒頭の部分と関係しているんだろうけど.....

$k_c \rightarrow 0$ とすることはつまり $T \rightarrow U$ とする、1 次の Born 近似と一致する。

■まとめと発展

更にこの実効 potential \tilde{U} の概念を、疑 potential として拡張し、希薄気体の性質の計算に利用することになる。

ところで、この実効 potential の重要な点は、短距離の相互作用を考えずとも厳密な計算が出来るということである。これは Born 近似や Hartree 近似、Hartree-Fock 近似に通じる概念であるってどういうこと??

付録 A van der Waals 相互作用の導出

付録 A.1 DERIVATION OF EQ.(5.3)

Section 5.1 で, van der Waals 相互作用の大きさについて

$$U_{\text{ed}} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 r^3} [\mathbf{d}_1 \cdot \mathbf{d}_2 - 3(\mathbf{d}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}})(\mathbf{d}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}})]$$

をいきなり与えたが, ここでは基礎に立ちかえって, この導出を確認しておこう。

図 1 のように, 2 つの水素原子が距離 $R = R_{AB}$ だけ離れて存在しているとす
る。このとき potential energy は当然

$$U = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[-\left(\frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{r'}\right) + \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{R_{12}} - \frac{e^2}{R_{1B}} - \frac{e^2}{R_{2A}} \right] \quad (\text{A.1})$$

となるが, 今回は希薄気体なので, R が十分大きな場合にのみ注目すればよく,

$$\begin{aligned} \frac{1}{R_{1B}} &= \|\mathbf{R} - \mathbf{r}\|^{-1} = [R^2 - 2(\mathbf{r} \cdot \mathbf{R}) + r^2]^{-1/2} \\ &\simeq \frac{1}{R} + \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{R}}{R^3} + \frac{3(\mathbf{r} \cdot \mathbf{R})^2}{2R^5} - \frac{r^2}{2R^3} \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

$$\frac{1}{R_{2A}} = \|\mathbf{R} + \mathbf{r}'\|^{-1} \simeq \frac{1}{R} - \frac{\mathbf{r}' \cdot \mathbf{R}}{R^3} + \frac{3(\mathbf{r}' \cdot \mathbf{R})^2}{2R^5} - \frac{r'^2}{2R^3} \quad (\text{A.3})$$

$$\frac{1}{R_{12}} = \|\mathbf{R} + \mathbf{r}' - \mathbf{r}\|^{-1} \simeq \frac{1}{R} - \frac{(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \cdot \mathbf{R}}{R^3} + \frac{3[(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \cdot \mathbf{R}]^2}{2R^5} - \frac{\|\mathbf{r} - \mathbf{r}'\|^2}{2R^3} \quad (\text{A.4})$$

の近似式を用いれば,

$$U = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{r'}\right) + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{R^3} [\mathbf{d}_1 \cdot \mathbf{d}_2 - 3(\mathbf{d}_1 \cdot \hat{\mathbf{R}})(\mathbf{d}_2 \cdot \hat{\mathbf{R}})] \quad (\text{A.5})$$

となる。ただしここで $e\mathbf{r} = \mathbf{d}_1$ などとし, また $\hat{\mathbf{R}} := \mathbf{R}/R$ を導入した。

水素原子以外の原子についても, (核子の電荷を Ze , 電子の電荷を e と置く, などという愚かな勘違いをし
なければ) 同様のことが言える。

付録 A.2 DERIVATION OF EQ.(5.4)

$\Delta E^{(2)}$ については若干複雑である。まず分母を

$$(E_0 - E_N)|_2 \text{ 粒子分} = (E_0 + E_0) - (E_n + E_{n'}) \quad (\text{A.6})$$

と, なじみの深い 1 粒子分の energy で表し直そう。

さて。そうすると, とりあえず

$$\Delta E^{(2)} = -\frac{1}{(4\pi\epsilon_0 r^3)^2} \sum_{N \in \text{励起状態}} \frac{|\langle nn' | [\mathbf{d}_1 \cdot \mathbf{d}_2 - 3(\mathbf{d}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}})(\mathbf{d}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}})] | 00 \rangle|^2}{E_n + E_{n'} - 2E_0} \quad (\text{A.7})$$

$$= -\frac{1}{(4\pi\epsilon_0 r^3)^2} \sum_{N \in \text{励起状態}} \frac{|\langle nn' | (x_1 x_2 + y_1 y_2 - 2z_1 z_2) | 00 \rangle|^2}{E_n + E_{n'} - 2E_0} \quad (\text{A.8})$$

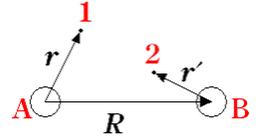


図 1 相互作用の模型

とできる。ここで対称性から $\hat{r} = e_z$ とした。ただし x, y, z などは d の各成分である。

ここで、^{ランダウ}Ландау先生は文献 [5, §89] で

$$\left| \langle nn' | (x_1 x_2 + y_1 y_2 - 2z_1 z_2) | 00 \rangle \right|^2 = 6 \left| \langle nn' | z_1 z_2 | 00 \rangle \right|^2 \quad (\text{A.9})$$

としているのだが、どうしてもこの式を素直に導けなかった。

例えば、(簡単のため $V := x_1 x_2 + y_1 y_2 - 2z_1 z_2$ として)

$$\sum_{\text{励起}} |\langle nn' | V | 00 \rangle|^2 = \sum_{\text{励起}} \langle 00 | V | nn' \rangle \langle nn' | V | 00 \rangle \quad (\text{A.10})$$

$$= \langle 00 | V^2 | 00 \rangle \quad (\because \langle 00 | V | 00 \rangle = 0) \quad (\text{A.11})$$

とすれば、

$$V^2 = x_1^2 x_2^2 + y_1^2 y_2^2 + 4z_1^2 z_2^2 + \dots \quad (\text{A.12})$$

となり、基底状態の対称性より

$$x^2 = y^2 = z^2 \quad xy = yz = zx = 0 \quad (\text{A.13})$$

が言えるので

$$\sum_{\text{励起}} |\langle nn' | V | 00 \rangle|^2 = 6 \langle 00 | z_1^2 z_2^2 | 00 \rangle \quad (\text{A.14})$$

$$= 6 \sum_{\text{励起}} \langle 00 | z_1 z_2 | nn' \rangle \langle nn' | z_1 z_2 | 00 \rangle \quad (\text{A.15})$$

となり、式 (5.4) と一致する。

しかしこのとき、本来は分数にかかっていた \sum を無理矢理分子だけに適用したわけなので、本来の energy と若干ずれるのではないかと思うのである。

僕にはどうしても Ландау 先生がごまかしているようにしか見えなかった。

付録 B 平面波の部分波展開

本章では、部分波展開の有名な公式

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (\text{B.1})$$

$$(\text{B.2})$$

を、文献 [3, §12.5] の証明 (若干天下りの的である) とは異なる方法で示す。

まず、平面波 e^{ikz} は、自由粒子の Schrödinger 方程式の解であり、すなわち原点でも正則であり、しかも方位角 ϕ に依らないゆえ、式 (5.12) と同様に球 Bessel 関数 $j_l(kr)$ と Legendre 多項式 $P_l(\cos \theta)$ の積として

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} A_l j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (\text{B.3})$$

として書ける。ところで両辺に $\int_{-1}^1 d(\cos \theta) P_n(\cos \theta)$ を施すと、この式は

$$\int_{-1}^1 d(\cos \theta) P_n(\cos \theta) e^{ikr \cos \theta} = \frac{2}{2n+1} A_n j_n(kr) \quad (\text{B.4})$$

となるが，ここで球 Bessel 関数の積分表示 [6, P.185]

$$j_n(kr) = \frac{1}{2i^n} \int_{-1}^1 d(\cos \theta) e^{ikr \cos \theta} P_n(\cos \theta) \quad (\text{B.5})$$

を考えると速やかに $A_n = i^n(2n+1)$ が示される。□

付録 C 同種粒子の衝突の場合の微分散乱断面積の導出

文献 [3, §12.2] では， $\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$ を以下のような方法で導出している。

Proof. まず，漸近形の波動関数

$$\phi(\mathbf{r}) = e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (\text{C.1})$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\mu} \Re \left[\phi^*(\mathbf{r}) \frac{\hbar}{i} \nabla \phi(\mathbf{r}) \right] \quad (\text{C.2})$$

を計算すると

$$\frac{\hbar}{i} \nabla \phi(\mathbf{r}) = \hbar k \left[\mathbf{e}_z e^{ikz} + \mathbf{e}_r f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} + O\left(\frac{1}{r^2}\right) \right] \quad (\text{C.3})$$

より， r が十分大きいとき ($r \rightarrow \infty$)

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) \rightarrow \frac{\hbar}{k} \mu \left[\mathbf{e}_z + \mathbf{e}_r |f(\theta)|^2 \frac{1}{r^2} + (\mathbf{e}_r + \mathbf{e}_z) \Re \left[f(\theta) \frac{e^{ik(r-z)}}{r} \right] + \dots \right] \quad (\text{C.4})$$

となる。この第 1 項は入射波の流れ $j_{\text{inc}} \mathbf{e}_z$ で，第 2 項が散乱波の流れ $j_{\text{sc}} \mathbf{e}_r$ であるとみなせるから， dN (散乱粒子の個数) の表式

$$dN = j_{\text{inc}} d\sigma = j_{\text{sc}} r^2 d\Omega \quad (\text{C.5})$$

に代入すると $\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$ が導かれる。

ただし，式 (C.4) の第 3 項は“干渉による項”であるため無視できる。[7, §18.6] □

今回は波動関数が

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} \pm e^{-ikz} + [f(\theta) \pm f(\pi - \theta)] \frac{e^{ikr}}{r} \quad (\text{C.6})$$

であるので

$$\frac{\hbar}{i} \nabla \psi(\mathbf{r}) = \hbar k \left[\mathbf{e}_z (e^{ikz} \mp e^{-ikz}) + \mathbf{e}_r [f(\theta) \pm f(\pi - \theta)] \frac{e^{ikr}}{r} + O\left(\frac{1}{r^2}\right) \right] \quad (\text{C.7})$$

より

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) \rightarrow \frac{\hbar}{k} \mu \left[0 \cdot \mathbf{e}_z + \mathbf{e}_r |f(\theta) \pm f(\pi - \theta)|^2 \frac{1}{r^2} + \dots \right] \quad (\text{C.8})$$

となる。

ところで，第 1 項は 2 つの粒子の入射波を考えたがために 0 となったのであり，1 つの粒子について言えば入射波の流れは先ほどと同じであると考えられる。ゆえに

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) = |f(\theta) \pm f(\pi - \theta)|^2 \quad (\text{C.9})$$

であると言えるだろう。□

付録 D 参考文献

- [1] Wikipedia english. <http://en.wikipedia.org>.
- [2] A. Marte, T. Volz, J. Schuster, et al. *Phys. Rev. Lett.*, **89**, , 283202, Dec. 2002.
- [3] 猪木慶治, 川合光. 『量子力学 II』. 講談社サイエンティフィック, Mar. 1994.
- [4] J. J. Sakurai. 『現代の量子力学 (下)』. 吉岡書店, May 1989.
- [5] E.D. Landau and E.M. Lifshitz. *Quantum Mechanics*, Vol. 3 of *Course of theoretical physics*. Pergamon Press, 3rd edition, 1977.
- [6] 森口繁一, 宇田川銈久, 一松信. 『岩波数学公式 III 特殊関数』. 岩波書店, Mar. 1987.
- [7] L. I. Schiff. 『量子力学』. 丸善株式会社, Apr. 1961.