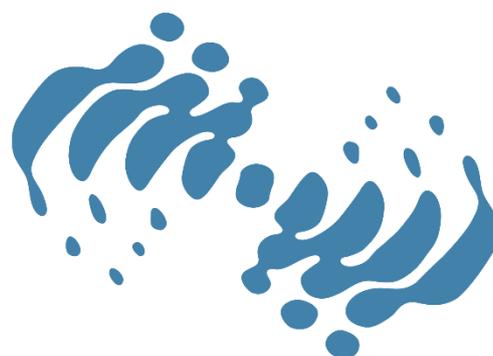


シリーズ「衝突論ノート」より
考える衝突論

島村 勲



**THE ATOMIC COLLISION
SOCIETY OF JAPAN**

考える衝突論

島村 勲

理化学研究所東原子分子物理研

shimamura@ribf.riken.jp

2017年3月9日; 2018年12月17日改訂

0 衝突論再入門

ーじっくり思考の勧め	4
0.1 波動関数は必ず滑らかか?	4
0.2 低エネルギー極限でも非等方散乱	5
0.3 弱い散乱の大きな効果	9
0.4 平面波は何粒子系か?	10
0.5 漸近的散乱波は自由運動解か?	10
0.6 入射波自体もゆがめるクーロン場	10
0.7 共線衝突は机上の空論	11
0.8 水素原子を $1s \rightarrow 2p$ 励起するには	12
0.9 最大散乱角, 虹, 等方散乱角分布	12
0.10 観測量ではない前方散乱断面積	15
0.11 縮退状態を識別しない断面積	16
文献・注	17

1 連続状態波動関数は直交しない

ー関数ではないデルタ関数	18
1.1 固有関数の直交性に疑問あり	18
1.2 ゼロでない平面波同士の内積	18
1.3 箱による人為的直交化は許せるか?	18
1.4 デルタ関数による直交化の誤解	19
1.5 フーリエ変換とデルタ関数	20
1.6 直交性の証明: 何が悪い?	20
付録 1A 3次元平面波への拡張	20
文献・注	21

2 ハミルトニアンはエルミートか?

ー世に散乱現象はあり得ない!	21
2.1 エルミート性は要請すべきものか?	21
2.2 実数観測値からの帰結	21
2.3 散乱現象非存在定理	22
2.4 エルミート性の破れ	22
2.5 固有関数展開はいつできるのか?	23

2.6 固有関数の直交性: 前章の宿題	24
2.7 いつエルミートなのか?	24
付録 2A 証明: 物理量演算子はエルミート	24
付録 2B 積分の差と表面項	25
文献	25

3 非弾性散乱だけ起こることはない

ー流れの保存と非保存	25
3.1 散乱は入射波を削らないのか?	25
3.2 非弾性散乱は必ず弾性散乱を伴う	26
3.3 流れの保存則	26
3.4 散乱波はどこから湧き出たか?	28
3.5 光学定理の物理的含蓄と拡張	29
3.6 複素ポテンシャルと流れの非保存	30
付録 3A 確率の変化速度	30
文献・注	30

4 まやかしのゼロ度弾性散乱断面積

ークーロン散乱も発散しない	31
4.1 小角散乱の立ち上がり	31
4.2 物理的意味を失う前方散乱断面積	31
4.3 小角散乱で破綻する古典論	33
4.4 消えても消えない剛体球断面積	34
4.5 まとめ: 前方はやばい	36
付録 4A 積分断面積の量子効果因子	36
付録 4B 低エネルギー剛体球散乱	36
付録 4C 剛体球散乱: 乱雑位相論の誤り	36
文献・注	37

5 禪問答: 影散乱はこうして起こる

ー完全吸収体は不完全吸収体	37
5.1 入射波と散乱波の干渉が生む散乱波	37
5.2 影散乱: 完全吸収体による弾性散乱	38

5.3 干渉を考えない影散乱表式	39	8 低エネルギー衝突でも摂動論	
5.4 干渉, 影, 影散乱: その本当の意味	40	— たかがボルン近似, されど…	56
5.5 流れの保存と干渉: 終りに当り . .	41	8.1 クーロン散乱にボルン近似は暴論 .	56
文献・注	41	8.2 ボルン近似は相互作用の運動量表示	57
6 散乱振幅の位相が断面積を変える		8.3 非弾性過程のボルン近似	58
— 似た者同士の衝突はややこしい	42	8.4 荷電粒子による電子状態遷移	59
6.1 古典論で表せないクーロン散乱 . .	42	8.5 ボルン近似成立時, 破綻時の光学極限	59
6.2 散乱振幅と断面積の関係を正す . .	43	8.6 低エネルギー電子-分子衝突	61
6.3 スピン0同士, 1/2 同士の衝突 . .	44	8.7 低エネルギーしきい則	62
6.4 一般のスピンと同種粒子衝突	45	8.8 高エネルギーでも無用のボルン近似	62
6.5 同種粒子: 古くて新しいテーマ . .	46	文献	64
付録 6A クーロン散乱振幅	47	9 複素エネルギー状態は実在するか	
付録 6B 同種粒子を交換した波動方程式	47	— 共鳴過程を陰で操る黒幕	65
文献・注	47	9.1 非物理的な複素エネルギー状態 . .	65
7 量子論に速度はあるか?		9.2 「共鳴状態」の定義いろいろ	65
— 動きの速さを表す演算子, って	48	9.3 摂動が作る準束縛状態	65
7.1 速度は位置の時間微分, か?	48	9.4 複素エネルギーのいろいろな起源	67
7.2 粒子性を表せる波動方程式	48	9.5 複素エネルギー面と共鳴公式	68
7.3 波束が動く群速度	49	9.6 高校数学で導くファーンの共鳴公式	69
7.4 量子論から導くニュートン方程式 .	50	9.7 共鳴散乱と直接散乱は干渉するか?	71
7.5 ぼやけていく波束	51	9.8 状態数分布とエネルギーの不確定性	71
7.6 時間非依存衝突論での速度	51	9.9 共鳴状態の生成・崩壊と時間遅れ .	72
7.7 演算子の時間微分はくせ者	52	9.10 共鳴状態を作らない共鳴過程? . . .	72
7.8 ハイゼンベルグ後の不確定性関係 .	53	9.11 フェッシュバツハ共鳴	73
付録 7A エネルギー保存, 運動量保存	54	9.12 形状共鳴	75
付録 7B 重心運動と相対運動	55	9.13 極冷量子気体と共鳴過程の制御 .	76
文献・注	56	付録 9A 射影演算子	78
		付録 9B エフィモフ効果	79
		文献・注	79
		教科書	80

衝突論やその基礎になる量子論につき優れた定評のある教科書、入門書を学ぶとき、論理の流れに神経を使いつつ納得行くまでじっくり吟味していくと、当面必要な知識を断片的に受け身で仕入れるだけでは見落とししてしまう盲点、興味ある物理、ハッとする事実にはしばしば出会います。淡々とした記述ゆえ読み過ぎしがちながら実は驚くべき重要な事柄にも気付きます。

そんなことを頭に置きながら、いくつかの基礎的な話を紹介します。これは原子衝突研究協会(2012年4月から原子衝突学会と改称)会誌「しょうとつ」に2010年5月から2012年7月まで掲載したシリーズ記事を原型とし、説明に工夫を加えて改訂、補足を施しつつ全体を再構成したもので、最近の話題も多少加えました。系統的議論を進めるでもなく、応用上重要な知識との視点でもなく、ものの考え方という観点から思いつくまま話を選びました。議論の裏付けのため、なるべく入門書、教科書を引用しますが、それで不十分と思えば専門書、総説、原著論文にも遡り、考察を加えてお伝えします。多少上級編のお話もなるべく噛み砕いて紹介します。論理的構成に気を使う教科書とは違い、後で解説する事柄を先取りして使うこともいといません。

巻末の参考書リストの番号は[1], [2]など、また各章末の文献リストは1), 2)などと表し、本文では^{1,2)}などと引用します。

元のシリーズで部分的なおさらいの意味も含め最終回に掲載した「衝突論クイズ」なる稿にかなり手を加え、本稿では第0章として本論へのいざないとしました。ある程度勉強された方を想定し、11項目の記述につき誤りがないか吟味いただき、その後、各項目に関わる物理の解説を通じ、基礎知識の再確認をお願いします。

第1, 2章, 第3~5章は続けて読むことを想定していますが、その後の章はそれぞれ独立です。

物理の理論は現実の複雑な諸現象を数学的、論理的に取扱いやすいように理想化し、物理的本質を抽出できるように構成されています。そこには自ずからいろいろな仮定が始めから入り込んでいます。また、理論の進行に伴い、何らかの

前提のもとに初めて導ける結論が次々と出てきます。これらの仮定、前提条件を常に頭に置きながら物理の考察を進める必要があります。これは入門編に限りません。各専門分野での「常識」なるものを、その前提条件を吟味せずに安易に無批判に使っている例にときどき気づきます。

理論の構成にはしばしば数学が関わります。そこで気を配りたいことの一つに物理変数の無限大極限があります。実際には大きな有限量を「事実上」無限大だとして数学的に扱いやすくする手軽な方便です。でも、その大きな値を数学的な無限大と見なして本当に問題がないのか、十分に確認する必要があります。また、求めた物理量の値がもしも無限大だったら、たいていの物理現象は有限だという原点に立ち返り、なぜそんな結果が出たのか、この無限大の本当の物理的意味は何なのかを熟考すべきでしょう。無限大をぞんざいに扱えば深遠な物理を見過ごします。

ついでながら、散乱理論では大きな距離 r での波動関数の漸近形をしばしば $r \rightarrow \infty$ と簡便表記するので、初学者は無限大極限と混同するかも知れません。しかし、大きくても有限な r の話だから漸近形が r の関数になるわけで、無限大極限なら r を含むはずはないですね。

物理学を学ぶ心得として、数学的理解と物理的理解のバランスには気を使いたいものです。数学的証明を追っただけで、よし、分かったぞと思わず、その物理的意味を考えようとする心がけが大切です。逆に、いわゆる「物理的描像」などという見てきたようないい加減な説明を鵜呑みにせず、その具体的意味を、必要なら数式を助けにしっかり考察したいものです。

「物理的直感」にも騙されないことです。得てして裏付けできない大雑把なあてずっぽうの言い訳で、しっかり証明された事実とたまたま一致したとしても、自分の直感は正しかったと主張する権利もない、いい加減な代物でありがちです。誰もが認める大家の直感なら、恐らく、綿密な思考訓練の豊富な経験や幅広い知識に基づく類推などに裏打ちされた、しかるべき背景が隠れている「直感」として傾聴すべきでしょうが、

0 衝突論再入門

ーじっくり思考の勧め

まず、散乱理論の基礎を一通り学んだ方々に、再確認のため、教科書の機械的な受け売りではない注意深い頭の体操をお勧めします。以下に述べる11項目の主張が完全に正しいか、誤りを含むか、含むなら何が悪いかお考えください。解答と解説を各主張と共通番号の各節に示します。

1. どんなシュレーディンガー (Schrödinger) 方程式も、波動関数は滑らかであるという物理的要請のもとに解かなければならない。

2. 球対称ポテンシャル $V(r)$ による弾性散乱のエネルギー E を十分に下げていくと、断面積は s 波だけでほとんど決まるようになり、角分布は必ずほぼ球対称になる。

3. 球対称ポテンシャル $V(r)$ による弾性散乱で、 s 波の位相のずれが 20° 、 p 波は 2° で d 波以上が無視できれば、事実上、 s 波だけで断面積がほぼ決まり、ほとんど等方散乱になる。

4. ポテンシャル $V(\mathbf{r})$ による質量 m の粒子の散乱を表すシュレーディンガー方程式

$$[-(\hbar^2/2m)\Delta + V(\mathbf{r})]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (0.1)$$

の解で、 $V(\mathbf{r})$ が無視できるくらい遠方で漸近形

$$\psi(\mathbf{r}) \sim C[e^{ikz} + f(\theta, \phi)e^{ikr/r}] \quad (0.2)$$

をもつものが表す系の粒子数は係数 C で調節できる。ただし、 k は波数で、散乱エネルギー E に

$$E = \hbar^2 k^2 / 2m \quad (0.3)$$

と関連付けられる。

5. 式(0.2)の入射平面波 e^{ikz} も散乱球面波 $f(\theta, \phi) \times e^{ikr}/r$ もシュレーディンガー方程式(0.1)で $V(\mathbf{r}) = 0$ とした自由運動方程式の正しい解である。

6. クーロン場による散乱では、入射波はポテンシャルの影響を受けずに進む平面波であるが、散乱球面波の動径部分は長距離相互作用の影響でいくら遠方でも e^{ikr}/r の形に近づかない。

7. 原子-2原子分子反応 $A+BC$ で、3原子が一

直線上を進む共線衝突 $A \text{---} B-C$ の断面積と、原子 A が分子軸に垂直に BC の中央めがけて入射する T 字型衝突の断面積を比べると、反応の起こりやすさへの立体効果を調べられる。

8. 静止水素原子 $H(1s)$ に運動エネルギー 14eV の α 粒子が衝突すれば、ある確率で $H(2p)$ 状態へ励起できる。

9. 静止ヘリウム原子にキセノンをぶつけて測った実験室系微分断面積 $q(\omega_L) = d\sigma_L/d\omega_L$ を使い、運動量移行断面積 $\sigma_m^{(L)} = \int (1 - \cos \theta_L) q(\omega_L) d\omega_L$ を計算するとき、 $1 - \cos \theta_L$ が最大になる実験室系散乱角 $\theta_L \simeq 180^\circ$ の $q(\omega_L)$ に最大の重みがかかる。

10. 散乱角ゼロでの弾性散乱微分断面積は、ポテンシャル $V(\mathbf{r})$ のもとで入射ビーム方向に出る流れの強度から $V(\mathbf{r})$ がいないときの強度を差し引けば、思考実験として原理的には決められる。

11. ある衝突実験で、標的のほぼ縮退している準位 A_1, A_2 からほぼ縮退している準位 B_1, B_2, B_3 に近縮退準位を区別できずに励起して断面積 $\sigma(A \rightarrow B)$ を測ったとする。その結果を理論断面積 $\sigma(A_i \rightarrow B_j)$ と比べると、後者を $i = 1, 2, j = 1, 2, 3$ につき加え合わせる必要がある。

0.1 波動関数は必ず滑らかか?

主張1は散乱理論というより量子論入門で、答はXです。相転移のような特殊な場合を除き、自然は滑らかで、物理の理論にはそれを反映させるべきだという信仰を確かに時おり耳にします。でも、波動関数は本当に物理的要請で必ず滑らかにすべきものでしょうか。

1次元箱型ポテンシャル $V(x)$

$$V(x) = \begin{cases} V_0 > 0 & (-a < x < a) \\ 0 & (x < -a, a < x) \end{cases} \quad (0.4)$$

のもとで波動関数 $\psi(x)$ は $x = -a, a$ で滑らかになるように、つまり、 $\psi(x)$ も $\psi'(x)$ も連続になるように決めなさいと教科書は教えます。¹⁾

$V_0 \rightarrow \infty$ の極限、剛体壁のときには、波動関数は領域 $-a < x < a$ には入り込めないのそこではべったりと $\psi(x) = 0$ 、そして $x = \pm a$ で連続と

いう条件から $\psi(\pm a)=0$ で、例えば x 軸の正負方向に対称な波動関数を考えれば、 $x < -a$ で $\psi(x) = -C \sin k(x+a)$ 、 $x > a$ で $\psi(x) = C \sin k(x-a)$ となります (k は式 (0.3) で定義される波数、 C は定数).²⁾ ん? 滑らか条件はどこへ消えた?

いや、実際、剛体壁波動関数は $x = \pm a$ でカクンと折れています (図1). 剛体壁ならそれを許される物理的理由を授業でどう習いました? だって、波動方程式を満たすんだもん、なんてまさか….

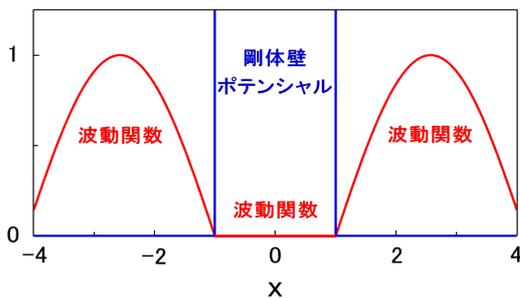


図1. 剛体壁 ($a=1$) のもとでの対称波動関数 $\psi(x)$. 壁の位置 $x = \pm 1$ で滑らかでない!

物理の理論にはしばしば無限大が現れます。ふつう、これは大きな量を理論的に扱いやすくするための人為的方便です。その物理的本質を理解するには、大きな有限値ならどうなのか、それをますます大きくしていくと物理的事情がどう変わるのか、しっかり見極める必要があります。

図2を見ると、有限壁の高さ V_0 を上げていくと波動関数が壁領域にだんだん入りにくくなり、壁の位置付近での波動関数の曲がり方がだんだん鋭くなり、極限 $V_0 \rightarrow \infty$ でついにカクンと折れます。剛体壁波動関数もあくまでも滑らかな波動関数の極限なのだということが分かります。

図2では x 軸の正負方向に対称な波動関数を示しましたが、これと独立なもう一つの関数、反対称波動関数についても同様に議論できます。

$r < a$ で $+\infty$ 、 $r > a$ でゼロという中心力ポテンシャル、つまり剛体球ポテンシャルによる弾性散乱の波動関数も、 $r < a$ でペタッとゼロ、 $r > a$ では漸近的な自由運動関数に等しく、 $r = a$ で連続ではありますが、カクンと折れます。その事情も1次元剛体壁と同じく理解できます。

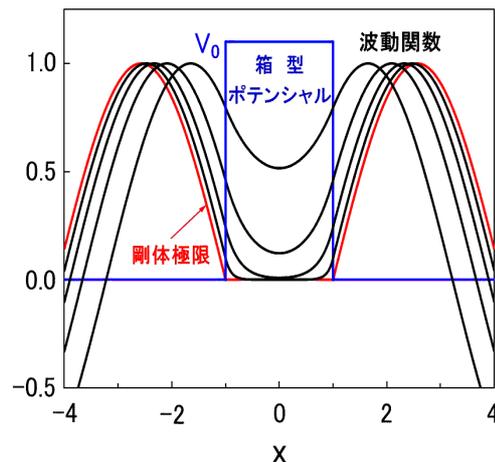


図2. 箱型ポテンシャル (0.4) の高さ V_0 が $2E$, $5E$, $17E$, $101E$, $+\infty$ と増えるにつれ、対称波動関数の壁付近での曲がり方が鋭くなり、折れ曲がる無限壁極限に近づく様子 ($a=1$, $k=1$). 各波動関数の最大値を1に規格化している。

理論屋がときに使うデルタ関数ポテンシャル $V(x) = C\delta(x-x_0)$ のもとでは、 $x=x_0$ で $\psi'(x)$ が突然ジャンプし、 $\psi(x)$ は滑らかではありません。

連続な $\psi(x)$ に滑らかでない点があれば、そこで1階微分 $\psi'(x)$ が不連続に跳び、2階微分 $\psi''(x)$ は有限な定数値をもたず、 $V(x)$ が有限 ($|V(x)| < +\infty$) ならシュレーディンガー方程式

$$-(\hbar^2/2m)\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (0.5)$$

は破綻します。逆に、 $V(x)$ がどこでも有限なら、ある点 x_0 での $\psi(x_0)$ と $\psi'(x_0)$ から出発して方程式 (0.5) を全 x 領域に亘り連続的に積分できます。 $\psi(x)$ の滑らかさは、物理的に「要請」というより、 $V(x)$ の有限性を条件にシュレーディンガー方程式が数学的に許す物理的事情なのです。

0.2 低エネルギー極限でも非等方散乱

確かにふつう低エネルギーでは s 波以外の散乱は弱くなり、ほとんど球対称な角分布を示します。³⁻⁵⁾ ただ、主張2のように「必ず」と言うなら、ブー、Xです。重要な例外、ラザフォード (Rutherford) 散乱を忘れては困ります。大きな r で相互作用がクーロン型 $V(r) \propto r^{-1}$ のとき、小角散乱の微分断面積は散乱角 θ に $d\sigma/d\omega \propto \sin^{-4}(\theta/2)$ と依存し、前方で無限大に発散します (第6.1節)。

大きな r で $V(r) \propto r^{-2}$ ならば、小角散乱の微分断面積は $d\sigma/d\omega \propto \sin^{-2}(\theta/2)$ と少し弱めの前方発散を起こします。

いかに低エネルギーでもこれらの前方発散は起こり、角分布は球対称になりません。これと球対称に近づく場合とで何が違うのでしょうか？

粒子が散乱中心に近づくと遠心力ポテンシャルの反発を受け、それが初期運動エネルギー E より高い領域 $r < r_c$ へはほとんど入れません(図3)。 E が低いほど大きな r_c で止められ、それが相互作用半径の外なら粒子は力を受けず、散乱は起こりません(図3, 短距離型)。でも、 s 波は遠心力を受けず、いくら低エネルギーでも相互作用領域に入り込むので s 波散乱だけは起こります。

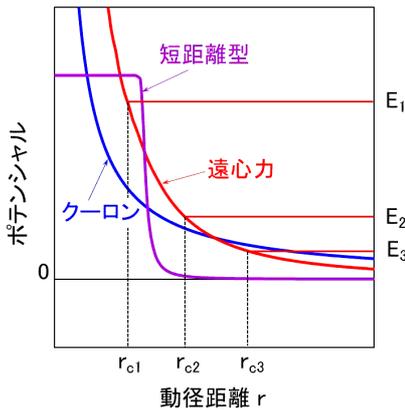


図3. 入射エネルギー E_1, E_2, E_3 のとき遠心力ポテンシャルが決める自由粒子の最近接距離 r_{c1}, r_{c2}, r_{c3} と散乱ポテンシャルとの関係. E_2, E_3 では短距離型ポテンシャルの領域に粒子が達するのを遠心力が阻止し、散乱を起こさせない。一方、クーロンポテンシャルは遠方で遠心力ポテンシャルに勝り、どんなに低エネルギーでもどの角運動量でも、弱いながら散乱を起こす。

ある種の同種粒子間では対称性から s 波衝突が禁止され、低エネルギーでは弱い p 波の非等方散乱が見られることがあります(第6.4, 6.5節)。

大きな r で $V(r) \propto r^{-1}$ なら、それが遠方では高い部分波の遠心力相互作用 ($\propto r^{-2}$) にすら打ち勝って(図3, クーロン)、低エネルギーでも弱い遠方・小角散乱ながら多数の部分波で起こし、前方で立ち上がる非等方散乱を示します。大きな r で $V(r) \propto r^{-2}$ なら、遠心力の強さを変えるような

影響を与える多数の部分波の散乱の寄せ集めで小角散乱が立ち上がります。

散乱長の物理的意味と役割

短距離型ポテンシャルによる低エネルギー散乱の断面積 σ はその s 波成分 σ_0 で決まると言いました。 σ_0 は s 波散乱の位相のずれ δ_0 により

$$\sigma_0 = (4\pi/k^2) \sin^2 \delta_0 = 4\pi/[k^2 + (k \cot \delta_0)^2] \quad (0.6)$$

と書けます。⁴⁾ 低エネルギー E では $k \cot \delta_0$ を E , または k^2 のべき級数で表せ,^{6,7)} それを

$$k \cot \delta_0(k^2) \simeq -A^{-1} + \zeta k^2 \quad (0.7)$$

と書き(図4)、どちらも長さの次元をもつ A を散乱長 (scattering length), 2ζ を有効距離 (effective range) と呼びます。 k^2 がごく小さいとき、式(0.7)の初項だけを式(0.6)に代入すれば、断面積

$$\sigma(k) \simeq \sigma_0(k) \simeq 4\pi A^2 / (1 + A^2 k^2) \quad (0.8)$$

が得られます。

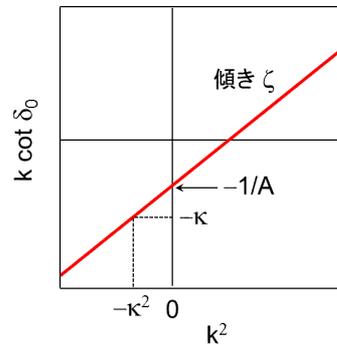


図4. 短距離型ポテンシャルによる低エネルギー s 波散乱の位相のずれ δ_0 が満たす式(0.7). 弱い束縛状態 $E_b = -\hbar^2 \kappa^2 / 2m$ がある場合の図。

散乱長 A は多くの教科書で定義され、波動関数がどんな性質をもつとき A がどうなるか図解してある教科書、文献もいくつか見られます。³⁾ でも、散乱長は実際にどう役立つのでしょうか？ 断面積の低エネルギー極限を別の言葉で言い換えているだけではないのでしょうか？ ただ、ゼロエネルギー断面積を測っても A の符号までは分かりません。では、符号には何か深い意味があるのでしょうか？ この節、少し長くなりますが、散乱長につき多少詳しく述べておきます。

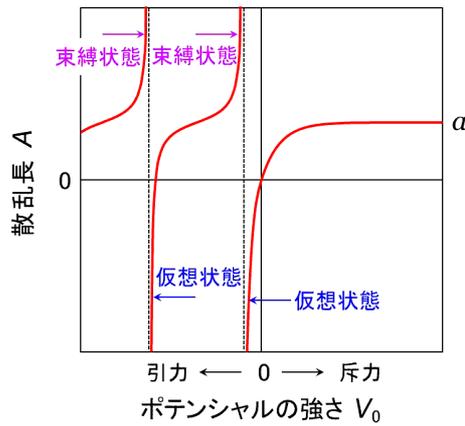


図5. 半径 a , 強さ V_0 の箱型または井戸型球対称ポテンシャルによる s 波散乱の散乱長 A が V_0 とともに変わる様子. 斥力では $A > 0$, 剛体球極限 $V_0 \rightarrow \infty$ で $A \rightarrow a$, 弱い引力では $A < 0$. 一つ, また一つと新たな束縛状態ができるぐらい引力が強くなるごとに A は $-\infty$ から $+\infty$ へ跳ぶ. 束縛状態 $e^{-|\kappa|r}$, 仮想状態 $e^{+|\kappa|r}$ のエネルギー $-\hbar^2\kappa^2/2m$ との関係については本文参照.

半径 a , 強さ V_0 の球対称ポテンシャルによる s 波散乱で散乱長 A が V_0 にどう依存するか, 図5に示します. 弱い斥力(引力)の箱型(井戸型)ポテンシャルにより低エネルギーの波はわずかに中心から外向きに押し出され(中心へ向かって引き込まれ), 負(正)の小さな位相のずれ δ_0 を生じ, $k \cot \delta_0 \simeq k/\delta_0$ が負(正)になるので式(0.7)により A は正(負)であることが分かります. 剛体球ポテンシャル $V_0 \rightarrow \infty$ では $A = a$ です(第4.4節).

ポテンシャルの井戸がだんだん深くなり, 一つ, 二つ, ... と束縛状態ができるようになると, その個数が新たに増える V_0 の臨界値で, つまり束縛エネルギーがほぼゼロの新たな束縛状態が生じるぎりぎりの V_0 で $\cot \delta_0(k^2=0)$ がゼロになることが証明でき, 式(0.7)により $-A^{-1}$ がゼロ, A は無限大に発散します(図5).^{5,6)}

この臨界値より少し深い井戸にはエネルギー $E_b = -\hbar^2\kappa^2/2m$, 漸近的波動関数 $\propto e^{-\kappa r}$ ($\kappa > 0$) をもつ浅い束縛状態があり, 図4で変数 k^2 を負値 $-\kappa^2$ にまで延ばして(数学的には解析接続して)やると, 束縛状態の境界条件を満たすためには $k \cot \delta_0(-\kappa^2) = -\kappa$ となることが示せます.⁷⁾ κ^2 が非常に小さければ, 式(0.7)または図4から

$$A^{-1} \simeq \kappa, \quad E_b \simeq -(\hbar^2/2m)A^{-2}, \quad (0.9)$$

したがって, $|E_b|$ が小さい束縛状態があれば $|A|$ は大きくなります. また式(0.8)より

$$\sigma_0 \simeq \frac{4\pi}{k^2 + \kappa^2} = \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \frac{4\pi}{E + |E_b|} \quad (0.10)$$

と分かります.

絶対値の小さな負エネルギーでのシュレーディンガー方程式を考えましょう. 一般に漸近波動関数は指数関数的に減少する項と増加する項の一次結合で, 特定のエネルギーでのみ増加項が消え, それが束縛状態です. 一方, 減少項が消えるエネルギーもあり, その状態 $\sim e^{-\kappa r}$ ($\kappa < 0$) を virtual state と呼びます(第9.10節). 本稿ではこれを仮想状態と訳します.

仮想状態は負エネルギー $E_b = -\hbar^2\kappa^2/2m$ をもつものの規格化できない非物理的状态ですが, $|E_b|$ の小さな仮想状態があると弱い束縛状態に関して述べてきたことが κ を負と考えればみな成り立ちます. 式(0.9), (0.10)も成り立ち, A は負になり, 図5の臨界 V_0 の左右で弱い束縛・仮想状態による A が逆符号で無限大に発散します.

束縛状態や仮想状態が V_0 の臨界値に近づき $|E_b| \rightarrow 0$ となる極限で, 式(0.10)の断面積はエネルギー E に反比例して発散します. 非常に小さな $|E_b|$ のときはこの双曲線がわずかに低エネルギー側にずれ, 有限ですが巨大な $\sigma(k^2=0)$ が見られます. この現象をゼロエネルギー共鳴と呼ぶ教科書も多いのですが,^{3,5)} 長寿命共鳴状態を中間状態として経るいわゆる共鳴散乱とは物理的にもエネルギー依存性も異なります. むしろ, 非常に弱い束縛状態または仮想状態により引き起こされる非共鳴・直接散乱(0.10)の極端なケースなのですから, ゼロエネルギー「共鳴」は誤解の元です. なお, 仮想状態は共鳴状態の極端な例であると誤解されがちですが, 両者の間にはギャップがあることを第9.10節で説明します.

以上のように, たった一つのパラメータ A , または高次項を代表する ζ も含め二つでゼロエネルギー近辺の散乱状態, 束縛状態, 仮想状態を統一的に表せます. また, 断面積を増大させる要

因が束縛状態なのか仮想状態なのかを散乱長の符号が顕わにします。これらは古くから知られた事実ですが、最近、極冷却量子気体の性質に深く関わる極低速原子衝突の記述に諸側面で役立っています。実験技術としては、極冷気体に磁場をかけて原子間相互作用を操り、散乱長を $-\infty$ から $+\infty$ まで自在に変え、量子気体の性質を制御できます。現実の量子系は多チャンネル系で、チャンネル間の関わり合いで生ずる共鳴のエネルギーを磁場で制御するのです(第9.13節)。

ラムザウアー効果を左右する散乱長

1920年代初頭。当時、原子による電子散乱の断面積は電子エネルギーを数10eVから下げていくと単調増加すると思われていたのに、Ar, Kr, Xeなどで1eV以下に極小が見られる、その速度の電子は気体中をすり抜けていくという驚くべき事実をラムザウアーが詳しく調べ、タウンゼントらが追認しました。^{8,9)} 量子論形成後まもなくこれは量子論特有の現象と解釈されました。^{4,9)}

低エネルギーなのでs波散乱が最重要です。式(0.6)によれば、位相のずれ δ_0 があるエネルギーで π ラジアン of 整数倍を通過すればそこに $\sigma_0(k^2)$ のゼロ極小が見られるはずです。強い散乱が起きているのに断面積がゼロになることは古典散乱では全くあり得ない奇異な現象です。当時の近似計算により、実際、重い希ガスではこれが起こっているとされました。これをラムザウアー-タウンゼント(Ramsauer-Townsend, R-Tと省略)効果、ラムザウアー効果などと呼びます。

物理的には、電子の波が標的希ガス原子の周りで回折され、非散乱の波とちょうど滑らかに繋がってしまう効果と解釈されます。¹⁰⁾ 波が1次元箱型ポテンシャルにぶつかるとき、特定のエネルギーである量が π ラジアン of 整数倍に一致して完全透過が起こる現象と似ています。¹⁰⁾

図6に示す電子-アルゴンs波散乱の位相のずれ δ_0 は途中でゼロを通過し、そこで断面積に極小が見られることが分かりますが、電子-ヘリウム散乱では δ_0 がゼロから単調に減少し、正エネルギーでゼロを横切らず、極小は起こりません。

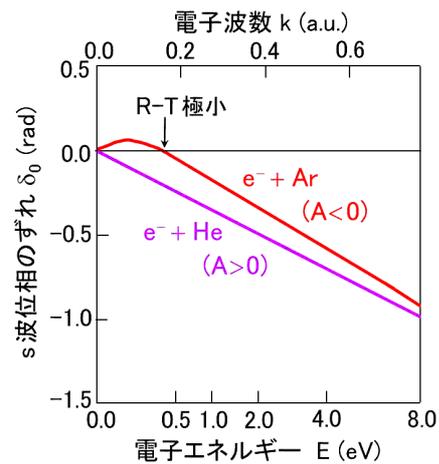


図6. ヘリウムとアルゴンによる電子のs波散乱の近似計算による位相のずれ δ_0 。アルゴン(散乱長 A が負)では δ_0 がゼロを通過するエネルギーで断面積にR-T極小が起こるが、ヘリウム(A が正)ではゼロを通過しない。

原子は双極子分極率 α_d をもつので、電子は比較的長距離型の分極相互作用 $\propto \alpha_d/r^4$ を原子から受けます。そのため、短距離型相互作用で成り立ったべき級数展開式(0.7)が破綻し、代りに

$$k \cot \delta_0(k) = -\frac{1}{A} + \left(\frac{\pi \alpha_d}{3a_0 A^2} \right) k + O(k^2 \log k) \quad (0.11)$$

が成り立ちます。⁷⁾ a_0 はボーア半径、 $O(\dots)$ は無視した項のうち主要項の波数依存性を示します。シュレーディンガー方程式には波数はエネルギーの形でしか入っていないのに、式(0.11)には k に比例する項、 $k^2 \log k$ に比例する項すらあります。

π の整数倍($m\pi$ とします)の不定性を除き δ_0 が小さければ $\cot \delta_0 \simeq \delta_0^{-1}$ なので、式(0.11)より

$$\delta_0(k) \simeq m\pi - kA - \left(\frac{\pi \alpha_d}{3a_0} \right) k^2, \quad (0.12)$$

したがって、これを $m\pi$ にする $k \simeq -(3Aa_0)/(\pi \alpha_d)$ でR-T効果が予想されます。アルゴンの分極率 ~ 11.2 a.u., 散乱長 ~ -1.5 a.u.によれば ~ 0.23 eVにこの効果が見られそうです。実際、0.3eV辺りに断面積の極小が観測されます。ヘリウムでは $A > 0$ なので正の k に断面積の極小は期待されません。実際、実験でも見つかっていません。

A の符号の効果は式(0.12)でも、また図6でも明らかです。アルゴンのように $A < 0$ なら位相のずれは $\delta_0(k=0)$ から一旦増え、その後、分極力

効果で減少し、ゼロを通過します。分極力は低エネルギーほどその効果をより発揮するので、逆に E が上がれば δ_0 を大きくする引力効果が減っていくのです。ヘリウムのように $A > 0$ なら、始めから δ_0 は減る一方で、ゼロを通過しません。

式(0.11)を(0.6)に代入した式を(必要なら高次項も補充後)低エネルギーで測定した断面積に当てはめれば、符号を含め、 A の値を決められます。

ところで、 δ_0 が大きいのに s 波断面積がゼロになるのが量子効果だと言いながら、図6の δ_0 はゼロを横切ることにご不審かと思えます。実は、断りもせず π の整数倍を無視して δ_0 を示すことがふつうで、図6でもそうしました。散乱電子も原子核近くでは強い引力を受けて独立粒子近似の動径波動関数にいくつか節をもち、自由電子に比べて大きな位相のずれを起こしています。ただ、電子相関を考慮すれば散乱電子の動径関数という概念は原子内領域ではあいまいになるので、 $m\pi$ にこだわらないのが近年の流れです。

理論的に明確にしたければ、無限に高いエネルギーでは散乱は起きないはずと考えてその位相のずれをゼロとし、連続的にエネルギーを下げたときにどれだけ位相が変化するかで π の整数倍を含めた絶対値を定義するのが妥当です。

電子-原子相互作用の引力性・斥力性の議論で本質的なのは電子が原子の外で受ける力です。例えば、液体ヘリウム中に捕えられた電子は周りのヘリウム原子に斥力を及ぼし、それらを押しつけていわゆる電子バブル、空洞を作ります。

0.3 弱い散乱の大きな効果

主張3, 一見、問題なさそうで、実はこれもブー、なのです。ともかく計算してみましょう。

s 波の位相のずれが $\delta_0 = 20^\circ$, p 波がわずか $\delta_1 = 2^\circ$, d 波以上はゼロです。積分断面積 σ は s 波, p 波成分の和で, $\sin^2 \delta_0 + 3 \sin^2 \delta_1 = 0.117 + 0.0037$ に比例します。 p 波による第2項は全体の3%にしかならず、確かに s 波だけでほぼ十分です。

微分断面積はどうでしょう。 s 波散乱振幅 f_0 は定数, p 波散乱振幅は $f_1 \cos \theta$ と書け,⁴⁾

$$\begin{aligned} d\sigma/d\omega &= |f_0 + f_1 \cos \theta|^2 \\ &\propto \sin^2 \delta_0 + 6 \sin \delta_0 \sin \delta_1 \cos(\delta_0 - \delta_1) \cos \theta \\ &\quad + 9 \sin^2 \delta_1 \cos^2 \theta \end{aligned} \quad (0.13)$$

となります。定数の第1項は s 波散乱, $\cos^2 \theta$ に比例する第3項は p 波散乱によるもの, $\cos \theta$ に比例する第2項が s 波と p 波の干渉項です。

図7に s 波の項を1とした相対微分断面積として s 波成分, p 波成分, そして干渉項も含めた全体を示します。 p 波成分は相対的に確かに相当小さく、ほとんど無視できます。しかし、干渉効果の何と大きいことか! 弱い p 波散乱が s 波の等方分布をこんなに変えてしまうことがあるのです。

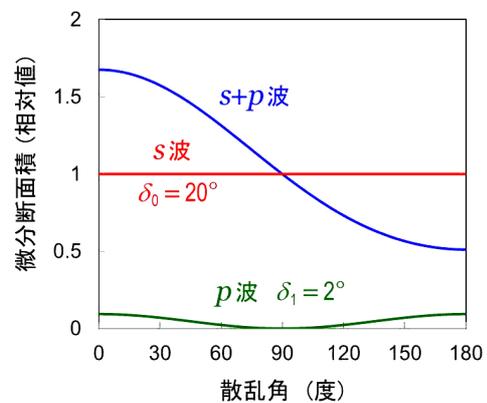


図7. s 波の位相のずれが $\delta_0 = 20^\circ$, p 波が $\delta_1 = 2^\circ$, d 波以上がゼロのときの微分断面積。 s 波のみ, p 波のみ, 両方入れたときの3種を, 球対称 s 波微分断面積に対する相対値で示す。

ちなみに、強い共鳴散乱が起るとき、それが s 波共鳴ならほぼ等方的角分布を示します。 p 波共鳴なら $\cos^2 \theta$ に比例して $\sim 90^\circ$ 方向に谷をもつ左右対称に近い角分布, d 波共鳴なら $(3 \cos^2 \theta - 1)^2$ に比例して $\sim (90 \pm 35)^\circ$ 方向に2つの谷をもつ左右対称に近い角分布になります。これに基づき、測定された共鳴微分断面積の形からしばしば共鳴の対称性を推論します。でも、非共鳴部分波との干渉で角分布の形はかなり変わり得ます。

この干渉がなければ、 θ を固定して微分断面積のエネルギー依存性を測るとその共鳴構造はどの θ でも積分断面積と同じ形を示します。でも、一般には非共鳴部分波との干渉の強さが θ に依るため共鳴形状も θ に依存します(第9.6節)。

なお、簡単に導ける三角関数の関係式、つまり物理的内容を何も含まないはずの公式

$$\sin^2(x+c) = (1+q^2)^{-1} \frac{(\epsilon+q)^2}{\epsilon^2+1} \quad (0.14)$$

$$(\epsilon = -\cot x, \quad q = -\cot c)$$

で x を共鳴の、 c をバックグラウンドの位相のずれとし、 ϵ をエネルギー E で表せば、部分波分解できる散乱の積分断面の共鳴形状を表すファノ (Fano) 公式が直ちに導けます (第9.6節)。

0.4 平面波は何粒子系か？

主張4はもちろん、Xですね。

まず、水素原子の波動方程式、波動関数を考えます。どちらも1粒子の位置座標 \mathbf{r} で表され、明らかに1電子系を記述し、波動関数 $\psi(\mathbf{r})$ に大きな係数をかけても多電子系は表せません。そこに見出し得る確率密度の意味を $|\psi(\mathbf{r})|^2$ にもたせるため、これを全空間に亘って積分すれば1になるように係数を選ぶ規格化を行います。

いま、「存在確率」と言わず、「そこに見出し得る確率」と表現しました。何らかの観測を行って初めてそれが「粒子」の形で姿を現すわけで、「存在確率」では観測をする前から「粒子」としてあちこちに存在する確率をもつような印象を与えかねないとの指摘があるからです。¹¹⁾

シュレーディンガー方程式 (0.1) もその散乱解も1粒子座標で表され、波動関数の係数 C の如何に係わらず、1粒子系しか表せません。さらに、散乱波動関数の場合、全空間に亘る積分が1になるような確率密度は定義できません。

しかし、 $\hat{\mathbf{v}} = -i\hbar\nabla/m$ として、

$$P(\mathbf{r}) = \psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = [\psi^*(\mathbf{r})\hat{\mathbf{v}}\psi(\mathbf{r}) - \psi(\mathbf{r})\hat{\mathbf{v}}\psi^*(\mathbf{r})]/2 \quad (0.15)$$

を定義すると、これらは流体の密度 $P(\mathbf{r})$ 、流束 $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ に対する連続の方程式を満たすことがシュレーディンガー方程式から導き出せます (第3.3節)。つまり、 $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ は確率の流れの流束、フラックスという物理的解釈ができ、衝突実験のビームの流束とも対応付けられ、散乱理論で重要な役割を果たします。言うまでもなく、この流束は

$|C|^2$ に比例します。でも、ある定常流全体の粒子数などという概念はありませんね。

$C=1$ とすると平面波 e^{ikz} の流束は $\hbar k/m$ となります。運動量/質量を速度と見なせば、これは古典流体の流束から納得できる結果です。でも、位置と運動量を同時には決められない量子論、いったん位置を測定すればその量子状態が乱され、後の時刻の位置を決められない量子論で速度とはいったい何なのか、それは第7章の話題です。

0.5 漸近的散乱波は自由運動解か？

漸近形 (0.2) はポテンシャル $V(\mathbf{r})$ が無視できる遠方での波動関数の形です。実際、 $\Delta = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$ ですから、シュレーディンガー方程式 (0.1) で $V(\mathbf{r})$ をゼロとし、 $E = \hbar^2 k^2/2m$ とした自由粒子の波動方程式を平面波 e^{ikz} が満たすことは簡単な計算で示せます。

極座標表示によれば、 $\Delta = r^{-2}\partial(r^2\partial/\partial r)/\partial r - \hat{L}^2/(\hbar^2 r^2)$ と書けます。角運動量演算子 \hat{L} を含む第2項は遠心力ポテンシャルを生む角運動の演算子です。大きな r ではこの項が無視でき、自由粒子の動径運動は s 波自由運動と同じく、確かに独立解 $e^{\pm ikr}/r$ をもち、式 (0.2) は漸近形として適切です。しかし、小さな r では第2項を無視できず、球面波 $f(\theta, \phi)e^{ikr}/r$ は自由運動方程式を満たしません。主張5は半分間違いです。

0.6 入射波自体もゆがめるクーロン場

主張6は、後半は○ですが、前半がXです。クーロン散乱は突拍子もない例外なのです。

いま宇宙にただ一つ、正電荷の陽子だけがあります。そこから何億光年も先から突然、自由電子が飛び出します。でも、飛び出した瞬間、自由を失います。いかに離れようとも、電荷をもつ限り平面波でなぞられません。

クーロン散乱理論の解説には必ず難しい特殊関数が使われ、うんざりするでしょう。ここでは事情を初等的に説明します。まず、関数

$$u(r) = \sin f(r),$$

$$f(r) = kr - (\alpha/2k) \log kr + \eta \quad (0.16)$$

を考えます。 α, η は勝手な定数です。簡単な微分演算で $u''(r) = f'' \cos f - (f')^2 \sin f$, また、大きな r ではこの右辺が $-[k^2 - \alpha/r + \text{高次項}]u(r)$ と書けることが示せます。つまり、 $u(r)$ は大きな r で

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{\alpha}{r} + \text{高次項} \right] u(r) = 0 \quad (0.17)$$

を満たします。これは大きな r でポテンシャル $V(r)$ がクーロン型 $\sim (\hbar^2/2m)\alpha/r$ を取るときの動径シュレーディンガー方程式を表します。

2階微分方程式ですから独立解がもう一つあります。 η は式 (0.17) に現れず、自由に選べるので、例えば $\pi/2$ だけずらした $\cos f(r)$ を第二の独立解として採用すると、式 (0.17) の解は大きな r で必ず $\sin f(r)$ と $\cos f(r)$ の線形結合で表せ、それを別の η 値を使った式 (0.16) の形に書き直せます。

式 (0.16), (0.17) が意味することは、ポテンシャルの漸近形がクーロン型なら、 α に比例する r の対数項が動径波動関数の漸近形の位相に必ず含まれること、位相へのクーロン場の影響が遠くへ行くほど強まることです。入射波も散乱波も、部分波分解すれば動径関数へのこの影響が宇宙の彼方まで消えないのです。クーロン力だろうと、遠方ではいくらでも弱まるはずなのに…。

厳密な理論によればクーロン散乱波動関数は

$$\exp[ikz + i(\alpha/2k) \log\{2kr \sin^2(\theta/2)\}] + f_C(\theta) \exp[ikr - i(\alpha/2k) \log 2kr]/r \quad (0.18)$$

という漸近形を取ります。^{12,13)} 上の部分波の議論の通り、実際、入射波 (第1項) でも散乱球面波 (第2項) でも、その位相にいかにも遠方でも増え続けるクーロン場の影響 $(\alpha/2k) \log kr$ が明らかです。しかも、入射波の進行方向が z 方向だけでなく、クーロン場で曲げられた波も含むのです!

ふつうの散乱理論では、相互作用がないときとの違いを散乱効果と判断します。自由運動を表す平面波に加えて新たに e^{ikr}/r に比例する漸近的散乱球面波を相互作用が生み、その振幅 $f(\theta)$ により微分断面積が $|f(\theta)|^2$ と表せるのです。ところが、クーロン散乱では式 (0.18) の入射波の位相にも散乱波の動径部分の位相にも相互作用効果

の一部が押し込められています。こんな奇妙な形なのに、多くの教科書にごく当り前のように微分断面積は $|f_C(\theta)|^2$ だと書いてあります。ほんとにいいんでしょうか? 実は、漸近形 (0.18) の2項とも位相の中の対数項が「流束に及ぼす影響」は r に反比例して遠方で弱まり、結局、 $|f_C(\theta)|^2$ を微分断面積と見なして構わないのです。¹³⁾

ちなみに、全空間領域で $V(r) = C/r$, つまり純粋クーロンポテンシャルなら微分断面積は

$$|f_C(\theta)|^2 = (C/4E)^2 \sin^{-4}(\theta/2), \quad (0.19)$$

ラザフォード断面積になります (第6.1節)。ところが、同種荷電粒子同士の衝突では、相互作用は同じ C/r でも、衝突粒子の識別不能性のため微分断面積は式 (0.19) になりません (第6章)。

0.7 共線衝突は机上の空論

主張7を○としてしまった人はいませんか? 共線衝突もT字型衝突も衝突パラメータ (衝突径数; 第4.3節) b がゼロのときにしか起こりませんよ。たった一つの衝突経路でしか起こらない過程に「断面積」は定義できません。ついでに、標的の大きさよりも太いビームを使わなければ断面積は測れないことも頭に置きましょう。

では、共線衝突とT字型衝突につき「反応確率」を比べれば立体効果を調べられるでしょうか? これらの型の衝突は単純でもあり、頻繁に議論されていて、現実性のある衝突モデルであるかのように思われがちです。でも、注意が必要です。

標的分子が軸対称なら、共線ではなくても分子軸に平行な一般の衝突 $b \geq 0$ につき、反応確率 $P(b)$ を定義できます。範囲 $b \sim b + \delta b$ の衝突は断面積 σ の一部分 $\delta\sigma = 2\pi b P(b) \delta b$ を生みます (付録4A)。この式から、共線に近い小さな b の衝突では $2\pi b P(b)$ ($\leq 2\pi b$) が小さく、3次元衝突の断面積にはほとんど効かないことが分かります。現実の3次元衝突は共線衝突の反応確率 $P(0)$ 自体には影響されず、共線からずれて b がゼロから増えるに従い $2\pi b P(b)$ がゼロからどう増えるかに依存します。これを b につきゼロから ∞ まで積分

すれば分子軸に平行なマクロな太さの入射ビームに対する断面積 $\sigma^{(0)}$ が得られます (付録4A).

垂直衝突は軸対称でなくて面倒ですが、分子軸に垂直に入射ビームを打ち込んだときの断面積 $\sigma(\pi/2)$ を定義できます。また、斜め入射も調べれば、反応の立体効果が明らかになります。

0.8 水素原子を $1s \rightarrow 2p$ 励起するには

主張8も間違いと、イオン衝突分野の学生さんならすぐ分かるでしょう。電子衝突の研究室ではどうでしょうか。

相対運動エネルギー E は一部または全部を入射粒子や標的の内部運動へ移せますが、孤立衝突系全体の重心運動は自由運動で、その運動エネルギーは変えられません (付録7B)。質量 m_T の静止標的に質量 m_P の粒子が運動エネルギー E_L で衝突するとき、全運動エネルギー E_L を重心運動と相対運動で $m_P:m_T$ と分け合うので、

$$E = E_L / (\gamma_e + 1) \quad (\gamma_e = m_P / m_T) \quad (0.20)$$

です。^{14,15)} いまの問題では、これが水素原子の $1s \rightarrow 2p$ 励起エネルギー 10.2 eV を上回るような E_L が必要です。α粒子と水素原子なら $\gamma_e = 4$ で、 $5 \times 10.2 \text{ eV} = 51 \text{ eV}$ 以上のα粒子だけが静止水素原子を $1s \rightarrow 2p$ と励起できるのです。

少し数値遊びで感覚を養うとよいでしょう。例えば、静止ポジトロニウム (電子-陽電子系水素型原子) を $1s \rightarrow 2p$ と励起するには、 ^{238}U イオンなら $\sim 1.1 \text{ MeV}$ ものエネルギーを要します。

0.9 最大散乱角, 虹, 等方散乱角分布

主張9, 二重の意味でXです。本節ではこれに関連するいろいろな側面を論じていきます。

まず、実験系散乱角 $\omega_L(\theta_L, \phi_L)$ と重心系散乱角 $\omega(\theta, \phi)$ との関係です。図8に質量 m_P の入射粒子の実験系での初速度 \mathbf{v}_L , 衝突後の速度 \mathbf{v}'_L , 静止標的 m_T の衝突後の速度 \mathbf{v}''_L , 重心速度 \mathbf{v}_{cm} , 重心系での入射粒子, 散乱粒子の速度 \mathbf{v}, \mathbf{v}' の関係を, 図9に両座標系での散乱粒子速度の関係を示します。¹⁴⁻¹⁷⁾ 衝突前, 後の相対運動エネルギー

を E, E' とすると,

$$\begin{aligned} \tan \theta_L &= \sin \theta / (\gamma + \cos \theta), \\ \gamma &= v_{\text{cm}} / v' = (E/E')^{1/2} (m_P/m_T) \end{aligned} \quad (0.21)$$

が成り立ちます。

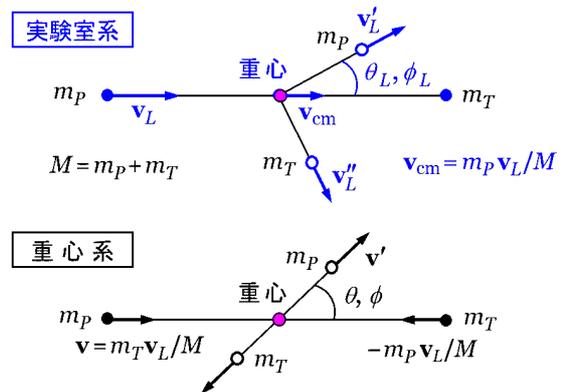
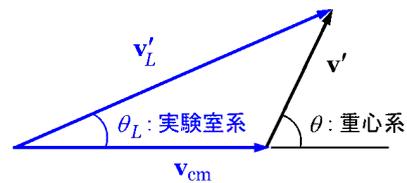


図8. 実験系と重心系での衝突粒子の速度.



$$\tan \theta_L = \frac{\sin \theta}{\gamma + \cos \theta}$$

$$\gamma = |\mathbf{v}_{\text{cm}}| / |\mathbf{v}'| = (m_P/m_T) (E/E')^{1/2}$$

図9. 重心系と実験系系の散乱角の変換を与える速度の和 $\mathbf{v}'_L = \mathbf{v}_{\text{cm}} + \mathbf{v}'$ ($\gamma > 1$ の図). E, E' : 衝突前, 後の相対運動エネルギー. $v' < v_{\text{cm}}$ なら $0^\circ \leq \theta \leq 180^\circ$ で θ_L に上限があることが分かる。

$\gamma = 1$ (弾性散乱なら $m_P = m_T$) なら式 (0.21) は $\theta_L = \theta/2$ と変形でき, 重心系で 0° から 180° までの散乱角が実験系では 0° から 90° までにしかならず, $\theta_L > 90^\circ$ は起こり得ません (図10).

$\gamma \ll 1$ なら明らかに $\theta_L \simeq \theta$ です。

$\gamma < 1$ (弾性散乱なら $m_P < m_T$) なら重心系の $0^\circ \sim 180^\circ$ で実験系の θ_L も $0^\circ \sim 180^\circ$ で単調増加します (図10). しかし, $\gamma = 1$ で突然, θ_L の最大値が半減します。この不連続の原因は, $\gamma \simeq 1$ では曲線 $\theta_L \simeq \theta/2$ から 180° 近くの θ で急に上向く, その曲がり方が γ が1に近いほど急激で, $\gamma \rightarrow 1$

の極限では全域で $\theta_L = \theta/2$ で $\theta = 180^\circ$ で垂直に立ち上がる折れ線に収束するためです (図10)。

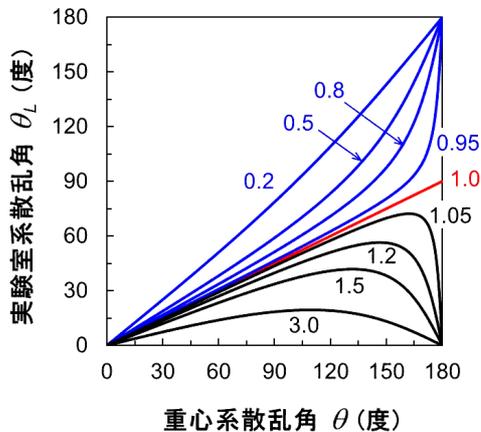


図 10. 実験室系と重心系での散乱角の関係 (0.21). 図中の数字は γ の値.

$\gamma > 1$ (弾性散乱なら $m_P > m_T$) なら, 重心系の θ がゼロから $\cos^{-1}(-\gamma^{-1})$ まで増えると θ_L はゼロから $\theta_L^{\max} = \sin^{-1}(\gamma^{-1}) (< 90^\circ)$ まで増え, θ がさらに増えるとともに θ_L は逆にゼロまで減っていきます (図10). γ が大きいほどこの最大角 θ_L^{\max} は小さくなります.

γ が上から1に近づくと, θ_L^{\max} は $\theta = 180^\circ$ により近い場所で起こり, 曲線の曲がり方もより鋭くなり, 直線 $\theta_L = \theta/2$ が $\theta = 180^\circ$ で突然折れて垂直に下降する形に収束します.

キセノンとヘリウムの質量比 131:4 から, 主張9の問題では θ_L^{\max} は $4/131$ ラジアン $\approx 1.7^\circ$ で, 実験室系でそれ以上の角度で散乱されることはありません. 主張9は当然, Xです.

相互作用 $V(\mathbf{r})$ による2体弾性衝突という単純な問題の場合, 重心運動を分離すると, 残りの相対運動は2体の換算質量に等しい質量の1粒子が場 $V(\mathbf{r})$ により散乱される問題, 式(0.1)と通常, 同等になります (付録7B).^{18,19)} この方程式を漸近境界条件(0.2)のもとに解けば重心系微分面積 $|f(\theta, \phi)|^2$ を得ます.

気体内の原子同士の衝突に関する知見から気体の性質を論じたいとき, 原子が速度分布をもっているため, この分布に亘る平均を取る必要があります. 原子A, 原子Bともある温度 T で熱

運動をしていれば, AB間, AA間, BB間の相対速度もみな温度 T の熱分布をすることが証明できます. これに基づき, すべての2体衝突の速度分布に亘る平均が重心系で問題なく計算できます.²⁰⁾

しかし, これには例外があります. 同種粒子同士の衝突ではその波動関数に要請される対称性を漸近形(0.2)は満たさないの, これを変更する必要があります (第6.2節).

実験室系と重心系での微分断面積の間には

$$\frac{d\sigma_L(\theta_L, \phi_L)}{d\omega_L} = \frac{(1 + \gamma^2 + 2\gamma \cos \theta)^{3/2}}{|1 + \gamma \cos \theta|} \frac{d\sigma(\theta, \phi)}{d\omega} \quad (0.22)$$

という関係があります.¹⁵⁻¹⁷⁾ 散乱流をすべて集めた積分断面積は, 当然, 座標系に依りません.

$\gamma > 1$ での最大散乱角 θ_L^{\max} では式(0.22)の変換係数の分母がゼロになるので実験室系微分断面積は無限大に発散します. ただ, これは弱い発散で, 座標系に依らない積分断面積は有限です.

この発散に似て非なる虹散乱という現象があります. それと比べるため, まず, この発散の物理的事実を少し考察します. 話を単純化するため, 球対称ポテンシャルを扱きましょう. 重心系から実験室系への微分断面積の変換は $d\sigma_L(\theta_L)/d\omega_L = (d\omega_L/d\omega)^{-1} d\sigma(\theta)/d\omega$, また $d\omega = 2\pi \sin \theta d\theta$ により $(d\omega_L/d\omega)^{-1} = [(\sin \theta_L)/(\sin \theta)]^{-1} (d\theta_L/d\theta)^{-1}$ となり, 図10で θ_L が極大値を取るとき $d\theta_L/d\theta = 0$ なので実験室系微分断面積が発散するのは. その物理的理由は, そこでは同じ θ_L の散乱を起こす θ 値の密度が無限に大きくなるからです.

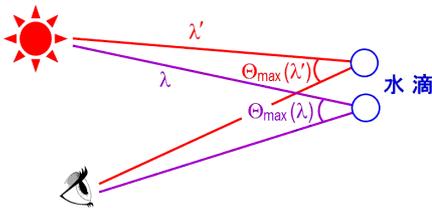
これは変数変換だけにに基づく現象で, 量子論, 古典論に共通であり, $\gamma > 1$ を満たす衝突系なら相互作用の如何に係わらず起こります.

また, $\gamma > 1$ なら, 各実験室系散乱角 θ_L で測定される散乱強度には異なる二つの重心系散乱が含まれています (図10). この二つは互いに独立な過程で, 入射粒子の散乱後の運動エネルギーを測れば区別できます. 同じ θ_L でも θ が小さい方が衝突後速度 v_L' が速いからです (図9). 独立な過程なので互いに干渉し合うことはありません.

七色の虹と古典弾性散乱

次に古典弾性散乱を考えます。衝突パラメータが $b \sim b+db$ の範囲の円柱殻に入射した粒子が角度 $\theta \sim \theta+d\theta$ の散乱を受けるとき、微分断面積は $d\sigma/d\omega = |2\pi b db / 2\pi \sin\theta d\theta| = |(b/\sin\theta)(d\theta/db)^{-1}|$ と書けます。²¹⁾ $\theta(b)$ が極値を取れば $d\theta/db=0$ で、この微分断面積はその θ で発散します。同じ散乱角 θ の散乱を起こす軌道の密度が無限に大きくなることがその物理的原因です。

この効果は光学現象にも現れます。球形の液滴に光線束が入射するとき、液滴表面への光線の入射角 χ は衝突パラメータ b に応じて決まります。この χ に対する散乱角 θ は波長 λ に依る液滴の屈折率 $n(\lambda)$ で決まり、2変数関数 $\Theta(b, \lambda)$ になります。それが $\partial\Theta/\partial b=0$ を満たす極値 $\Theta_{\max}(\lambda)$ では光散乱強度が無限大に発散し、波長に応じてずれる特定角度に強く光が出るプリズム効果を示します。大気中の水滴により散乱されて肉眼に入る太陽光の散乱角 θ が、したがってこのプリズム効果により波長 λ が、水滴の位置に依り異なるために色が別れたきれいな虹が見えるのです。これに光の波動性による補正を施すと現実の虹をよく表します。²¹⁾ 散乱強度の発散機構の類似性から $\theta(b)$ の極値で起こる古典微分断面積の発散を虹散乱と呼んでいます。



虹散乱の古典論に量子補正を施すには、多数の部分波成分 l が散乱を受けるために l を連続変数と見なす半古典論を適用します。位相のずれの微分 $\partial\delta_l/\partial l$ が古典散乱角に、また l が衝突パラメータ b に対応づけられ、散乱振幅 $f(\theta)$ の部分波分解を b の言葉で解釈できます。こうして、古典論のような発散は起こらないものの、虹散乱に相当する半古典論的断面積 $|f(\theta)|^2$ が明らかに見られます。²²⁾

古典論の $\theta(b)$ 曲線の極値の左右には、同じ散乱角 θ を起こす b の値が少なくとも二つあります。これらは軌道ではっきり区別できる過程ですが、量子論効果で波の性質が備われば二つの波の重ね合わせで干渉が起こりそうだと推測され、事実、それを半古典論で示せます。これら二つの b は同じ散乱角 θ に対する散乱振幅 $f(\theta)$ の二つの部分波成分 $f_l(\theta)$, $f_{l'}(\theta)$ に相当し、微分断面積 $|f(\theta)|^2 \simeq |f_l + f_{l'}|^2 = |f_l|^2 + |f_{l'}|^2 + 2\text{Re}[f_l^* f_{l'}]$ には干渉項(第3項)による微細振動が見られます。²²⁾

これは $\gamma > 1$ で同じ $\theta_L(\theta)$ を生む異なる θ の散乱の間に干渉が生じないのと対照的です。また、 $\theta(b)$ の極値付近での様子が相互作用の詳細を反映するのに対し、 $\theta_L(\theta)$ は相互作用に無縁な分かり切った関係であることもすでに指摘しました。

2種類の微分断面積

次に、重心系運動量移行断面積(第8.2節)

$$\sigma_m = \int (1 - \cos\theta) [d\sigma/d\omega] d\omega \quad (0.23)$$

の計算で微分断面積にかかる重みを考察します。うっかりすると、 $1 - \cos\theta$ が最大になる 180° 近辺で微分断面積に最も高い重みが付くかのように思えるかも知れません。でも、 $d\omega = \sin\theta d\theta d\phi$ です。例えば軸対称問題では、 $d\sigma/d\omega$ にかかる重みは $2\pi \sin\theta (1 - \cos\theta)$ になり、これは $\theta = 120^\circ$ で最大値、 180° では最小値ゼロを取るのです!

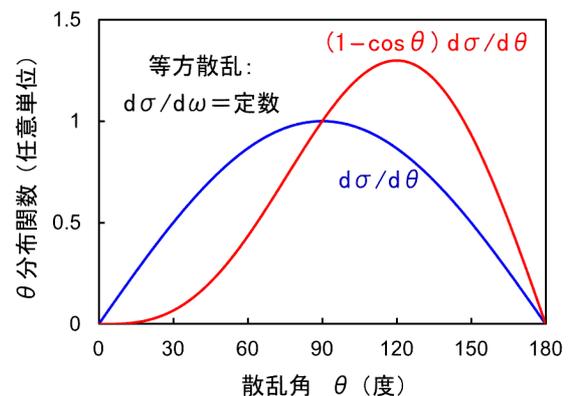


図 11. 等方散乱の角分布 $d\sigma/d\theta = 2\pi \sin\theta d\sigma/d\omega$ と運動量移行断面積の微分 $d\sigma_m/d\theta = (1 - \cos\theta) \times d\sigma/d\theta$. それぞれを θ の全領域に亘り積分すれば積分断面積 σ と運動量移行断面積 σ_m を得る。

θ でそのまま積分すれば積分断面積 σ が得られる角分布関数 $d\sigma/d\theta$ も微分断面積と呼ばれることがよくあります。立体角微分の微分断面積とは $d\sigma/d\theta = 2\pi \sin\theta d\sigma/d\omega$ の関係があります。

四方八方に球対称に散乱される等方散乱は $d\sigma/d\omega = \text{定数}$ と表せますが、このとき微分断面積 $d\sigma/d\theta$ は $\sin\theta$ に比例し、 $\theta = 90^\circ$ で最大になる山形の分布を示します(図11)。 θ で積分すれば運動量移行断面積になる $d\sigma_m/d\theta = (1 - \cos\theta)d\sigma/d\theta$ も等方散乱につき図に含めてあり、 120° で最大、前方と後方でゼロに落ちるのが見られます。

0.10 観測量ではない前方散乱断面積

主張10は散乱理論の大前提をおろそかにした人は騙されるかも知れませんが、原子衝突の実験屋さんなら直ちにXと分かるはずです。

ビーム減衰法という実験法があります。気体を詰めた箱に空けた穴から粒子ビームを入射し、反対側に空けた穴から出てくるビーム強度を測定し、その減衰は気体分子との衝突による軌道のそれが原因だと解釈して散乱積分断面積を決める伝統的な手法です。そう、ビーム中の粒子が散乱されれば前方強度が減るのは当たり前、銀行じゃあるまいし、利息が付くわけないんです。これを散乱の量子論に即して考えてみましょう。

ポテンシャルがないとき、平面波による一方向($\theta = 0$)への一定の流束 $F_{\text{平}}$ が流れているとします。ポテンシャルがあれば、これに加えて新たに大きな球面から四方八方に流束 $F_{\text{球}}$ が出てきます。この流束を $F_{\text{平}}$ 方向($\theta \simeq 0$)成分とそれ以外とに、 $F_{\text{球}} = F_0 + F_{>}$ と別けましょう。

前方に理想的な検出器を置けば、ポテンシャルのないとき $F_{\text{平}}$ を、ポテンシャルがあれば $F_{\text{平}} + F_0$ を検出するはずですから、主張10は両者の差 F_0 から前方散乱の微分断面積を決められると言っているわけです。

ところがここに、波動関数が表す流束が必ず従う流れの保存則があります(第3.3節)。実数で時間に依らないふつうのポテンシャル場のもとでは、流れはどこから湧き出ることも、どこへ吸

い込まれることもあり得ず、どんな空間でも、そこに入る流束とそこから出る流束とは差し引きゼロで、全体として平衡を保つという法則です。 $F_{\text{平}}$ 自体は明らかにこれに従います。したがって、必ず $F_0 + F_{>} = 0$ です。前方以外の散乱の断面積を決める $F_{>}$ が正であれば、 F_0 が負でなければ流れの保存則に反します。えっ、負の微分断面積？

そもそも、入射流束 $F_{\text{平}}$ が散乱により減っていないのに、あちこちに散乱される流れはいったいどこから湧き出てきたのでしょうか？ いや、湧き出るはずがないと流れの保存則が断言しているのです。常識的にも、入射流束は必ず散乱流の分だけ削り取られているはずで、それを負の前方流束 $F_0 = -F_{>}$ が表しているのだと考えるのが自然です。 F_0 と $F_{>}$ とは、どうもその物理的意味が違うようです。

実は、前方散乱は特殊です。定評ある教科書を注意深く読むと、散乱理論の定式化の前にその前提条件が挙げてあり、ゼロ近辺の散乱角は除くとか、前方散乱以外なら問題ないとの断り書きが見られます。^{17, 23-25} なぜなのでしょう？

散乱波動関数の漸近形(0.2)をご覧ください。第2項の散乱球面波が表す流束を第1項の入射平面波の流束と比較して微分断面積の表式を出す、というのがお決まりです。いや、待ってください、量子論ですよ。二つの波を重ね合せれば、一般にその間に干渉が起こります。それを無視して入射波と散乱波の流束を別々に扱うのでは誤りが生ずるはずで、しかし、計算してみると、球面波のうち平面波と違う方向に出る部分と平面波との干渉は散乱角 θ の関数として激しく正負に振動し、その平均はゼロで、事実上、無視できます。遠方まで平面波と重なり合う前方散乱部分だけが負の干渉効果を流束に及ぼし、負の F_0 を生じて入射流束を削ります(第3.4節)。

削り取られた前方流束が周りへ振りまかれるのが全散乱なので、前方散乱波と積分断面積とは深く関係するはずで、事実、積分断面積がゼロ度散乱振幅の虚部に比例するという「光学定理」が流れの保存則から導びかれ、この

法則と光学定理が同等であることが分かります(第3.5節). 光学定理は中心力場による粒子の散乱を部分波分解法で扱い, 位相のずれで表した積分断面積と散乱振幅の表式を見比べて証明することがよくあります.⁴⁾ しかし, それだけでは単なる数式の証明に過ぎず, その深い物理的意味が見えません. さらに, 流れの保存則からの導出なら, 非弾性散乱を含む多チャネル過程へも簡単に拡張できます(第3.5節).

ゼロ度微分断面積は思考実験でも決して直接測れない空想の産物です. 干渉が無視できる条件で定義された断面積を干渉のある領域へむりやり外挿したものです. しかし, 干渉領域の角度範囲は $\theta < \Delta\theta \sim (kr)^{-1/2}$ と遠方でいくらでも狭くなります(第3.4節). ですから, $r \rightarrow \infty$ の極限で干渉領域は消え失せ, ゼロ度微分断面積が意味をもつはずだと思っても知れません. でも, いかに大きな有限の r でも $\theta = 0$ は必ず干渉領域に含まれ, ゼロ度微分断面積は宇宙の果てでも測れません. また, 流れの保存則を満たすにはあらゆる方向への散乱を必ず干渉項が埋め合せなければならず, いくら r を大きくして干渉領域幅を狭めても, それとともに干渉はどんどん強まります. $r \rightarrow \infty$ ではこの埋め合せを $\theta = 0$ がデルタ関数的に一手に引き受けます. だからこそ, 光学定理が成り立つのです.

0.11 縮退状態を識別しない断面積

主張11も答はブーです. 測っている過程の始状態は A_1 か A_2 の「いずれか一方」です. 終状態については, B_1 も B_2 も B_3 もすべてひっくるめた総計を測っています. 断面積 $\sigma(A_i \rightarrow B_j)$ を終状態 j につき加え合せ, 始状態 i については平均した値を測定していることとなります. もしも A_1, A_2 に分圧 P_1, P_2 ずつ分布しているなら, 始状態の確率はその分圧に比例するので, 重み付き平均を取る必要があります. 状態 A_i ($i=1, 2, \dots$) に P_i ずつ分布していれば, $P = \sum P_i$ として

$$\sigma(A \rightarrow B) = \sum_{ij} (P_i/P) \sigma(A_i \rightarrow B_j) \quad (0.24)$$

となります. この両辺に衝突速度をかけて速度分布に亘り平均すれば, 反応速度定数 κ につき

$$\kappa(A \rightarrow B) = \sum_{ij} (P_i/P) \kappa(A_i \rightarrow B_j) \quad (0.25)$$

が導けます.²⁶⁾ このとき, 第0.9章で述べた熱平衡気体内での分子間相対速度は同じ温度で熱分布をするという事実が役立ちます.²⁰⁾

それでもまだ始状態と終状態に対して対称でない形にじっくりこない方のため, 始状態についても和を取れば奇妙な結果が出ることをお話しします. いま, 標的がすべて同じ始状態 A にあるとし, そのうち半分が占める状態に A_1 , 残りの半分が占める状態に A_2 と名付けます. 名前は違っても同じ状態です. それぞれの半分についての断面積間には等式 $\sigma(A_1 \rightarrow B_j) = \sigma(A_2 \rightarrow B_j) = \sigma(A \rightarrow B_j)$ が成り立つので, 始状態 A_1, A_2 について断面積を加え合えれば, 本来の断面積の2倍になってしまいます. 3分割して加え合えれば3倍になってしまいます. 始状態について加え合えた値はどうにでもなってしまうのです.

*** **

いかがでしたか? うっかりすると○を付けてしまいそうで, 実は, 正解は全部×. ただ, ○×自体よりも, いろいろな話題を吟味熟考したことが大事なのです. ひっかけ問題まがいを感じられたものもあつたかも知れませんが, 特殊なケースにまで機械的に「常識」を持ち込むなどいかにげんな論文原稿を読むにつけ, 綿密な思考, 例外に敏感な注意深さをふだんから訓練しておく必要性を痛感します. 何かを学んだとき, 少しひねくれて, それが当てはまらない例を考えてみるのも一案でしょう.

拾い読み, 伝え聞きで入ってきた断片的な知識を, ああ, そういうものなんだと無批判に頭に入れることなく, 議論の前提条件や論理の筋道に気を配りながらその妥当性をじっくりと考えることの重要性はお伝えできたでしょうか. 次章から, テーマごとに少し詳しく議論します. お楽しみいただければ幸いです.

第0章 文献・注

- 1) 江沢洋 [1], §7.2, §7.5.
- 2) 江沢洋 [1], §6.3.
- 3) 砂川重信 [2], §3.6.
- 4) 高柳和夫 [3], §2-3.
- 5) B. H. Bransden and C. J. Joachain [4], §12.3.
- 6) L. I. Schiff [5], §39.
- 7) N. F. Mott and H. S. W. Massey [6], §II.9.
- 8) 市川行和, しょうとつ, 第3巻第3号 (2006); 別冊「しょうとつ」原子衝突実験の歩み (2009).
- 9) N.F.Mott and H.S.W.Massey[6], §XVIII.1-3.
- 10) L. I. Schiff [5], §19. 1次元問題については §17 を参照のこと.
- 11) 江沢洋 [1], §5.2. そう言いながら, §5.3 以降では存在確率という言葉遣いをしている.
- 12) 高柳和夫 [3], §2-5.
- 13) B. H. Bransden and C. J. Joachain [4], §12.5.
- 14) 高柳和夫 [3], §1-3.
- 15) B. H. Bransden and C. J. Joachain [4], Appendix 2.
- 16) 砂川重信 [2], §1.3. 本稿の式(0.22)のべき $3/2$ がこの文献では $2/3$ と誤記されている.
- 17) L. I. Schiff [5], §18.
- 18) 砂川重信 [2], §2.1.
- 19) 高柳和夫 [3], §2-2.
- 20) 高柳和夫 [3], §1-6.
- 21) M. S. Child [7], §2.2.
- 22) M. S. Child [7], §5.1, 5.2.
- 23) 砂川重信 [2], §2.3.
- 24) B. H. Bransden and C. J. Joachain [4], §12.2.
- 25) L. D. Landau and E. M. Lifshitz [8], §123.
- 26) R. D. Levine [9], §3.1 補足.

1 連続状態波動関数は直交しない

— 関数ではないデルタ関数

1.1 固有関数の直交性に疑問あり

量子論の教科書によれば、共通なハミルトニアン¹の固有関数 ψ_E と $\psi_{E'}$ は固有エネルギー E , E' が違えば一般に直交すると証明できます(第1.6節).¹⁻³ 複素共役を*で、系を記述する座標空間全体に亘る積分を $\int d\tau$ で表したときに、

$$(\psi_{E'}, \psi_E) = \int \psi_{E'}^* \psi_E d\tau \quad (1.1)$$

で定義される内積がゼロと積分計算を実際にせずに分かり、理論展開の上で大変便利です、このことからいろいろ重要な結果が導けます。

ところが、衝突論で入射ビームを表す自由粒子の波動関数、平面波同士は、エネルギーが違ってても内積(1.1)をゼロにしないことを次節で証明します。これは重要なことですが、はっきり注意を促してある入門書を見かけません。なぜ平面波は一般論に従わないのでしょうか？

教科書はまた、連続状態では内積(1.1)はデルタ関数 $\delta(E - E')$ に比例するとも言います。⁴⁻⁶ じゃ、やっぱり $E' \neq E$ では内積がゼロ？これはいったいどうしたことでしょう(第1.4節)？

1.2 ゼロでない平面波同士の内積

波数 k で座標 z 方向に進む平面波 $\exp(ikz)$ の非直交性を証明しましょう。粒子質量を m とすると $E = (\hbar k)^2/2m$ ですから、 $E' \neq E$ は $k' \neq k$ を意味します。以下、 $q = k - k'$ とします。

内積は z の全領域 $(-\infty, +\infty)$ に亘る積分ですが、まず有限領域 $(-Z, +Z)$ での積分を計算すると

$$\begin{aligned} I_Z(q) &\equiv \int_{-Z}^{+Z} e^{-ik'z} e^{ikz} dz = \int_{-Z}^{+Z} e^{iqz} dz \\ &= (iq)^{-1} (e^{+iqZ} - e^{-iqZ}) \\ &= (2/q) \sin qZ \quad (k' \neq k \text{ のとき}) \end{aligned} \quad (1.2)$$

となります(記号 \equiv はその右辺の式を左辺の記法で表すという意味)。図12に $I_Z(q)$ の一例を示します。⁴ $I_Z(q)$ の $Z \rightarrow \infty$ の極限が内積 $(e^{ik'z}, e^{ikz})$

ですが、 q を固定して Z を増やすと $I_Z(q)$ はどこまでも振動し、ゼロになぞ収束しません。 $k' = k$ なら被積分関数は1なので内積は無限大です。

3次元平面波 $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) = e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z}$ でも、変数 x, y, z それぞれについて上の議論をすれば結論は同じことです。

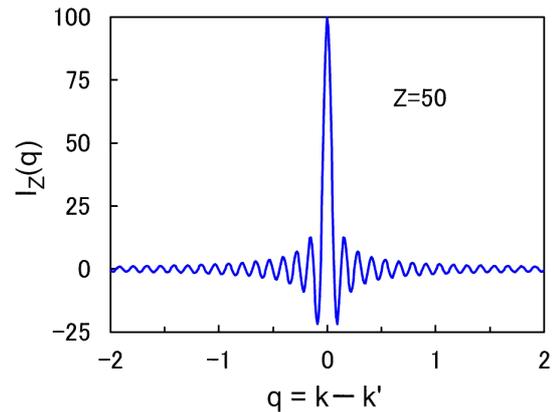


図12. 式(1.2)の関数の一例 $I_{Z=50}(q)$. 波数 q と座標 Z の単位は互いに逆数なら何でも同じ。

1.3 箱による人為的直交化は許せるか？

一方、自由粒子を強引に箱に閉じ込めて自由を奪えば離散状態化でき、その波動関数 ψ_n はエネルギーが違えば直交します。例えば、1次元領域 $0 \leq z \leq Z$ を考え、両端でゼロとの条件を ψ_n に課すと、整数 n で規定された固有関数 $\psi_n(z) = N_n \sin(n\pi z/Z)$ (N_n は規格化定数) を得ます。変数変換 $x = \pi z/Z$ により内積 $(\psi_{n'}, \psi_n)$ は

$$\begin{aligned} \frac{(\psi_{n'}, \psi_n)}{N_{n'} N_n} &= \frac{Z}{\pi} \int_0^\pi \sin n'x \sin nx dx \\ &= \frac{Z}{2\pi} \int_0^\pi \{\cos(n'-n)x - \cos(n'+n)x\} dx \\ &= \frac{Z}{2\pi} \left[\frac{\sin(n'-n)x}{n'-n} - \frac{\sin(n'+n)x}{n'+n} \right]_0^\pi \\ &= 0 \quad (n' \neq n \text{ のとき}) \end{aligned} \quad (1.3)$$

を満たし、異なる $\psi_{n'}, \psi_n$ は明らかに直交します。

例えば、銀河系サイズの箱ならこれら離散状態のエネルギー間隔は極端に狭く、ほとんど連続状態と見なせそうです。平面波の実部、虚部と本質的な違いはなさそうです。それなのになぜこちらは直交するのでしょうか。直交、非直交、

どちらが正しいのでしょうか。どうせ銀河系サイズの自由空間で実験なんかできないのに、その先までも自由空間とする平面波でしか成り立たない非直交性なぞ無意味なのでしょうか。

物理学の理論体系は複雑な現実の物理系から本質的側面を抽出した理想化模型に基づいて構築されています。例えば、平面波 e^{ikz} は x, y 方向に同じ値でいくらかでも延びる、無限に太く、無限に長いビームを表します。実験に使う、巨視的サイズではあっても有限なビームを正確には表しませんが、これは理論を数学的に取扱いやすく単純化して物理的理解を得やすくするとともに、微視的過程の議論へのこの理想化による弊害は事実上ないものと考えて使うわけです。

もちろん、箱に閉じ込めるのももう一つの理想化で、どちらを選んでも構いません。大事なことは、平面波を使うなら一貫してその枠組を守ること、箱で離散化するならそれを使い続けることです。平面波による理論を展開しながら箱による離散化でだけ成り立つ事実、例えば直交関係を使えば、大間違いを犯しかねません。

1.4 デルタ関数による直交化の誤解

次の問題は、平面波の非直交性と内積がデルタ関数 $\delta(k-k')$ に比例することとの矛盾です。実はこれは見かけだけの矛盾で、名前が悪くてデルタ関数を関数と勘違いするために起きるのです。 $k' \neq k$ なら $\delta(k-k')=0$ 、 $k'=k$ で無限大というよく見る漫画の弊害です。この漫画は「当たらずと言えども遠からず」で、物理では大いに役立ちますが、連続状態の内積は「当たらず」のため誤りを招く数少ない例の一つなのです。

「性質の良い」束縛状態型関数 $F(k')$ につき式

$$F(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} F(k')\delta(k-k')dk' \quad (1.4)$$

が必ず成り立つような $\delta(k-k')$ が本物のデルタ関数です。^{4,7,8)} 広範囲の関数 $F(k')$ から $k'=k$ での値だけを取り出すのだから $k' \neq k$ で $\delta(k-k')$ はゼロだろうと思うのはもっともです。でも、 $\delta(k-k')$ が変数 k' でどう表せるかは問わず、積分演算(これも本当はふつうの積分とは違うんですが…⁷⁾)

を伴って初めて意味をなす、超関数(英語では distribution ですが、単なる分布ではない数学用語です)と呼ばれる、ふつうの関数とはひと味違う代物なのです。^{4,7,8)} 入門書⁵⁾でもデルタ関数は‘distribution’であると断ってはいますが、では distribution とは何なのか説明が見当たりません。

一般に「連続状態波動関数はデルタ関数により規格直交化される」と言われます。その意味は、平面波 $\psi_E=(2\pi)^{-1/2}e^{ikz}$ に即して言えば、仮に

$$\begin{aligned} \delta(k-k') &\equiv (\psi_{E'}, \psi_E) = (2\pi)^{-1}(e^{ik'z}, e^{ikz}) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(k-k')z} dz \end{aligned} \quad (1.5)$$

と書けば、「こうして定義された $\delta(k-k')$ は」性質の良さを表すある種の条件を満たす勝手な $F(k')$ につき式(1.4)を満たすということです(3次元空間での平面波については付録1Aを参照)。心もとないかも知れませんが、式(1.5)の右辺の積分結果には一切触れていません。つまり、デルタ関数による規格直交化は内積 $(e^{ik'z}, e^{ikz})$ の値自体については元々何も言っていないのですから、非直交との矛盾も何もありません。

なお、式(1.5)で k と z の役割を入れ換えれば

$$\delta(z-z') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(z-z')k} dk \quad (1.6)$$

が導けます。

さて、積分(1.4)の右辺で $\delta(k-k')$ の替わりに式(1.2)の $I_Z(q=k-k')$ を使ってみましょう：

$$\int_{-\infty}^{+\infty} F(k')I_Z(k-k')dk'. \quad (1.7)$$

Z が大きいと $I_Z(k-k')$ は狭い $k' (\neq k)$ の勝手な区間内で細かく正負を振動し(図12)、積分(1.7)の被積分関数も細かく振動し、正負の打ち消し合いでこの k' 区間の積分はほぼゼロになります。振動周期は $Z \rightarrow \infty$ でいくらかでも小さくなり、この k' 区間内で $I_{Z \rightarrow \infty}(k-k')$ は実質的にゼロと同じ役割を果たします。例外は $k' \rightarrow k$ ($|q| \rightarrow 0$) のときで、 $I_Z(q) = 2Z(\sin qZ/qZ) \rightarrow 2Z$ と、 Z の増大とともにいくらかでも増えます。したがって、平面波の内積 $I_{Z \rightarrow \infty}(k-k')$ は上に述べた漫画の関数と「実質的に」同等で、式(1.5)が式(1.4)を満たすことは定数因子を除き納得できます。

1.5 フーリエ変換とデルタ関数

ここでまた別の側面から議論します。有限で滑らかな関数 $F(k)$ のフーリエ (Fourier) 変換

$$f(z) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} F(k') e^{-ik'z} dk' \quad (1.8)$$

はフーリエの反転公式と呼ばれる関係

$$F(k) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(z) e^{ikz} dz \quad (1.9)$$

を満たします (3次元空間への拡張は付録1Aを参照).^{4,7,9,10} 式 (1.8) を (1.9) に代入すると,

$$\begin{aligned} F(k) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} F(k') e^{-ik'z} dk' \right\} e^{ikz} dz \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} F(k') \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(k-k')z} dz \right] dk' \quad (1.10) \end{aligned}$$

となります。大括弧内は正に式 (1.5) の右辺ですから、それを $\delta(k-k')$ と書けば式 (1.10) は式 (1.4) そのものになります。こうして平面波の内積 (1.5) がデルタ関数になることが証明されました。

ウソで～す。騙されてはいけません。一見、証明できたかのように見えるかも知れませんが、実は式 (1.8), (1.9) の対を証明せずに使っていました。単に、平面波の内積がデルタ関数になることはフーリエ反転公式と同等だと示しただけなのです。でも、それも大事なことです。

1.6 直交性の証明：何が悪い？

固有関数の直交性を証明しておきましょう。^{2,11} ハミルトニアン \hat{H} の一つの固有関数 ψ_i が満たす固有値方程式 (シュレーディンガー方程式)

$$E_i \psi_i = \hat{H} \psi_i \quad (1.11)$$

および他の固有関数 ψ_j が満たす固有値方程式の複素共役

$$E_j \psi_j^* = (E_j \psi_j)^* = (\hat{H} \psi_j)^* \quad (1.12)$$

をまず書いておきます。式 (1.11) に ψ_j^* をかけ、式 (1.12) に ψ_i をかけて辺々引き算すると

$$(E_i - E_j) \psi_j^* \psi_i = \psi_j^* (\hat{H} \psi_i) - (\hat{H} \psi_j)^* \psi_i \quad (1.13)$$

が得られます。両辺を全空間に亘り積分し、第2.2節で説明するハミルトニアンのエルミート性

$(\psi_j, \hat{H} \psi_i) = (\hat{H} \psi_j, \psi_i)$ を使うと

$$(E_i - E_j) (\psi_j, \psi_i) = 0 \quad (1.14)$$

となり、 $E_i \neq E_j$ ならば $(\psi_j, \psi_i) = 0$ 、つまり ψ_i と ψ_j の直交性が結論されます。

平面波の非直交性は、この議論が平面波には当てはまらないことを意味します。なぜなのか、それが本章冒頭の疑問でした。第1.2節の議論によれば、平面波については無限空間での積分 (ψ_j, ψ_i) は不定のはずです。ところが、式 (1.14) によれば、平面波であろうがあるまいが確かにゼロのはずです。どうしても心配なら、まず積分領域を大きな有限領域として直交性を証明し、それを無限に大きくした極限を取れば無限領域での直交性が導けるでしょう。もちろんこれは第1.2節の結果に矛盾するので、どこか間違っているのでしょうか。いったいどこがいけないのか、それは第2.6節で種明かしをいたします。

付録1A 3次元平面波への拡張

第1.5節の議論を3次元空間に拡張するには、3次元フーリエ変換、逆変換公式⁹⁾

$$f(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3/2} \int F(\mathbf{k}') e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{k}', \quad (1A.1)$$

$$F(\mathbf{k}) = (2\pi)^{-3/2} \int f(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} \quad (1A.2)$$

を使います。3次元空間の波数ベクトル \mathbf{k} 方向に進む平面波 $\psi_E = (2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ につき、内積

$$\begin{aligned} (\psi_{E'}, \psi_E) &= (2\pi)^{-3} (e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}}, e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}) \\ &= (2\pi)^{-3} \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} = \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \quad (1A.3) \end{aligned}$$

が導けます。なお、式 (1A.1) で \mathbf{k}' を \mathbf{r} に、 \mathbf{r} を \mathbf{k} に置き換えると

$$f(\mathbf{k}) = (2\pi)^{-3/2} \int e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} F(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = (\psi_E, F) \quad (1A.4)$$

と書け、フーリエ変換は自由運動固有関数の完全系による波動関数 $F(\mathbf{r})$ の展開係数、 $F(\mathbf{r})$ の運動量成分分布、あるいは座標表示から運動量表示への変換という意味をもちます (第8.2節)。

第1章 文献・注

- 1) 江沢洋 [1], §6.3.
- 2) B. H. Bransden and C. J. Joachain [4], §2.2.
- 3) L. I. Schiff [5], §10.
- 4) 江沢洋 [1], §7.3.
- 5) B. H. Bransden and C. J. Joachain [4], §2.1.
- 6) L. I. Schiff [5], §11.
- 7) 吉田耕作, 加藤敏夫, 大学演習応用数学 I (裳華房, 1961), 第3章.
- 8) C. Cohen-Tannoudji et al. [10], Appendix II.
- 9) C. Cohen-Tannoudji et al. [10], Appendix I.
- 10) フーリエ変換の定義は指数関数の肩の係数が文献により多少違うが, これは本質的な違いではない. なお, 反転公式が成り立つ $F(k)$ についての詳しい条件はここでは省略する.
- 11) C. Cohen-Tannoudji et al. [10], §II.D.

2 ハミルトニアンはエルミートか?

— 世に散乱現象はあり得ない!

2.1 エルミート性は要請すべきものか?

量子論の物理量はエルミートという性質をもつ演算子で表されると言います.^{1,2)} エルミート演算子が表す物理量を測れば実数値を得るから, 物理量演算子にはエルミート性を要請すべきだとする教科書を散見します.²⁾ 非エルミートでも実数観測値を得る可能性を吟味しない安易な発想ですが(第2.2節), 物理量演算子のエルミート性が量子力学の理論展開の諸場面で駆使され, 重要な結果がいろいろ導かれることは事実です.

ところが, 散乱理論で当然のようにハミルトニアンのエルミート性を使うととんでもない間違いを犯すことがあります. 例えば, どんなポテンシャルによっても決して散乱なぞ起こらないことが証明されてしまいます(第2.3節). これはいったい何を意味しているのでしょうか? 衝突論の世界では量子力学の基本原則, 物理量演算子のエルミート性が崩れてしまうのでしょうか? 散乱現象は量子論では扱えないのでしょうか?

2.2 実数観測値からの帰結

第1章で内積

$$(\phi, \psi) = \int \phi^* \psi d\tau = \left(\int \psi^* \phi d\tau \right)^* = (\psi, \phi)^* \quad (2.1)$$

を議論しました. 本章では ψ が ϕ に演算子 \hat{A} を施した内積 $(\phi, \hat{A}\psi)$, $(\hat{A}\phi, \psi)$ を調べます.

まず, \hat{A} が何らかの実数定数か実数関数 A をかける演算とします. すると $A^* = A$ で, また単純なかけ算はどんな順番で行っても構わないので

$$\int \phi^* (A\psi) d\tau = \int A\phi^* \psi d\tau = \int (A\phi)^* \psi d\tau, \quad (2.2)$$

$$(\phi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}\phi, \psi) \quad (2.3)$$

が成り立ちます. 式(2.1)を使えばこれと同等な

$$(\phi, \hat{A}\psi) = (\psi, \hat{A}\phi)^* \quad (2.4)$$

も得られます. 複素数定数や複素数関数にかかる演算では一般に式(2.3), (2.4)は成り立ちません.

一般の演算子 \hat{A} につき, どんな ϕ, ψ に対しても式(2.3)のように \hat{A} が施される位置を移しても内積は変わらず, 式(2.4)のように ϕ と ψ を交換すると元の内積の複素共役になるなら, \hat{A} はエルミート (Hermitian), または自己共役 (self-adjoint) だと言います.¹⁻³⁾ 実数定数や実数関数にかかる演算子はエルミートです. エルミート性は「実数」関数のかけ算の拡張概念と言えます.

規格化された波動関数 ψ で表される多数の同等な物理系につき演算子 \hat{A} の物理量を測定するとその値 (当然, 実数値) は系により異なり, 平均値は $\langle \hat{A} \rangle_\psi \equiv \langle \psi, \hat{A}\psi \rangle$ となります. 式(2.4)で $\phi = \psi$ とすれば, \hat{A} がエルミートなら $\langle \hat{A} \rangle_\psi$ が実数だと分かるので, 物理量演算子にエルミート性を「要請」してつじつまを合わせてしまいがちです.²⁾ でも, これはいささか不必要に強引です. 実は, 逆に $\langle \hat{A} \rangle_\psi$ が実数でなければならないというごく当たり前の物理的要請さえすれば, \hat{A} のエルミート性を理論的に帰結できるのです (付録2A).¹⁾

エルミートな \hat{A} の測定値にバラつきが全くないという条件を ψ に課せば, 固有値方程式 $\hat{A}\psi_n = \alpha_n \psi_n$ が導けます.¹⁾ 固有値 $\alpha_n = \langle \psi_n, \hat{A}\psi_n \rangle$ が必ず実数であることも直ちに分かります.

測定値が全エネルギーになる演算子であるハミルトニアンももちろんエルミートです.^{1,2)} た

だし、理論的な拡張として複素数物理量や非エルミート演算子を「仮定してみたらどうなるか」という上級編はありで(第3.6節, 第9章), 興味深く、役に立つ結果がいろいろ導けます。

関数列 $\psi_i (i=1, \dots, N)$ により $A_{ij} = (\psi_i, \hat{A}\psi_j)$ として $N \times N$ 行列 A を定義すれば, 式(2.4)は関係式 $A_{ij} = A_{ji}^*$ と同等です. すべての要素がこの関係を満たす行列をエルミート行列と呼びます.⁴⁾ エルミート行列 A はエルミート演算子 \hat{A} の一つの行列表現です. エルミート行列の固有値がすべて実数であることも簡単に証明できます.⁴⁾

2.3 散乱現象非存在定理

ポテンシャル場による粒子の散乱を考えます. ハミルトニアン \hat{H} は運動エネルギー演算子 \hat{T} とポテンシャル演算子 \hat{V} の和で表されます:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}. \quad (2.5)$$

散乱境界条件を満たす正しい波動関数 Ψ_E とその入射平面波部分 Φ_E は波動方程式

$$\hat{H}\Psi_E = E\Psi_E, \quad \hat{T}\Phi_E = E\Phi_E \quad (2.6)$$

を満たします. E は全エネルギーです.

散乱振幅 f_E は一般に Ψ_E と Φ_E で

$$f_E \propto (\Phi_E, \hat{V}\Psi_E) = (\Phi_E, [\hat{H} - \hat{T}]\Psi_E) \quad (2.7)$$

と書けることが知られています.⁵⁻⁷⁾ 式(2.6)に基づきこれを変形すると

$$\begin{aligned} f_E \propto (\Phi_E, [E - \hat{T}]\Psi_E) &= ([E - \hat{T}]\Phi_E, \Psi_E) \\ &= (0, \Psi_E) = 0 \end{aligned} \quad (2.8)$$

となります. ここで \hat{V} の具体形は全く使っていませんから, どんなポテンシャル場のもとでも決して散乱は起こり得ないとの定理が証明されました. えっ, そんなバカな….

いったいこの証明のどこがまずいのでしょうか? 式(2.7)は良く知られた散乱理論の基本公式で, 疑う余地はありません. 式(2.8)でエネルギー E と自由運動のハミルトニアン \hat{T} との差がエルミートだとの事実を使いました. 量子論の常識としてこれにも問題はないはずです(第2.2節).

2.4 エルミート性の破れ

少し別の角度から眺めましょう. 球対称ポテンシャルによる質量 m , 運動量 $\hbar k$ の粒子の部分波散乱を調べます. 動径運動エネルギー演算子 $\hat{T}_r = -(\hbar^2/2m)d^2/dr^2$, および粒子の全エネルギー $E = \hbar^2 k^2/2m$ により演算子 \hat{L} を定義します:

$$\hat{L} \equiv \frac{2m}{\hbar^2}(E - \hat{T}_r) = \frac{d^2}{dr^2} + k^2. \quad (2.9)$$

$r=0$ でゼロになる動径波動関数で, さらに

$$\phi(r) \sim \sin kr, \quad \psi(r) \sim \cos kr \quad (2.10)$$

という漸近形をもつ ϕ, ψ を例に取り, 式(2.3)の両辺の差を $\hat{A} = \hat{L}$ につき計算します. 実はそれぞれの積分を実際に計算しなくても, 差を取れば, 付録2Bの式(2B.2)と漸近形(2.10)から

$$(\phi, \hat{L}\psi) - (\hat{L}\phi, \psi) = [\phi^*\psi' - \phi'^*\psi]_{r \rightarrow \infty} \quad (2.11)$$

$$= [-k \sin^2 kr - k \cos^2 kr]_{r \rightarrow \infty} = -k \quad (2.11a)$$

と, 関数 $\phi(r), \psi(r)$ の具体形がどうであろうと, ゼロでない値になることが分かります.

どんな ϕ, ψ に対しても式(2.3), (2.4)が成り立てば \hat{A} はエルミートです. 式(2.3), (2.4)を満たさない ϕ, ψ の組が一つでもあれば非エルミートなので, 式(2.11a)は \hat{L} が, つまり $E - \hat{T}_r$ が非エルミートなことを表します. これが原因で, $E - \hat{T}$ も $E - \hat{H}$ も非エルミートになるのです.

というわけで, 前節の奇妙な結論は $E - \hat{T}$ にエルミート関係式を使ってしまったことが原因だったのです. Φ_E, Ψ_E につき式(2.11a)のような項が残るために式(2.3), (2.4)が破綻してしまうことに気付かなかったのです.

私のD論のテーマ, 散乱の位相のずれに対するコーン(Kohn)の変分法を自力で導こうとして $E - \hat{H}$ のエルミート性を使ってしまい, うまくいかずにしばし悩みました. 誤りに気づいてから手もとの教科書を調べても, どこにもこの問題を注意喚起してないのが不思議でした.

有限区間ではどんな事情になっているのでしょうか. 例として, 内積 (u, v) を動径変数の有限区間 $0 \leq r \leq R$ での積分 $(u, v)_R$ に置き換えて試して

みます。すると、式(2.11)は

$$(\phi, \hat{L}\psi)_R - (\hat{L}\phi, \psi)_R = [\phi^*\psi' - \phi'^*\psi]_{r=R} \quad (2.12)$$

になることが式(2B.2)から分かります。この半径 R の球面上での値(表面項と呼びます)は一般にゼロでなく、有限区間ではエルミート性が破れます。例えば、全座標空間を有限領域とその残りに別けて扱うR行列理論にはこの破綻が当然現れます。そこで、やっかいな表面項を人為的に取り去ってハミルトニアン行列をエルミート化し、扱いやすくしています。その人為的操作のおつりはもちろん理論的に正しく処理し、全体として元々のシュレーディンガー方程式に全く矛盾しない定式化になっています。

2.5 固有関数展開はいつできるのか？

連続状態では教科書に反してハミルトニアン \hat{H} が非エルミートだという事実、また有限領域に閉じ込められた系には離散状態しかないはずなのに、有限領域でも \hat{H} がエルミート性を失うことをどう理解すればよいのでしょうか。

演算子はその演算手順、例えば $\hat{A} = d/dr$ を指定するだけでなく、どんな種類の関数に施すのか(これを \hat{A} の定義域と呼びます)を明確にして初めてその性質をしっかりと議論できるのです。束縛状態型関数に施されるハミルトニアンと連続状態型関数に施されるものとは同じ形でも性質が違い、前者はエルミートでも後者は違うと理解できます。物理の教科書でははっきり断らずに前者だけ議論していることが多く、後者に注目する本章と矛盾するように見えるのです。

演算子の定義域の指定で重要なのが関数の境界条件です。有限区間 $0 \leq r \leq R$ に限定した動径波動方程式を考えましょう。その固有関数 $\psi_i(r)$ には当然の条件 $\psi_i(r=0) = 0$ に加え、境界条件

$$\psi_i(r=R) = 0 \quad (2.13)$$

または

$$r=R \text{ で } d(\log \psi_i)/dr = \psi_i'/\psi_i = \text{実数定数} \quad (2.14)$$

(外側の境界で対数微分が一定)をふつう要請し

ます。これを満たす関数全体を定義域とするハミルトニアン \hat{H} の固有値問題を解くのです。

なぜこんな境界条件を課すのでしょうか？ 1次元の周期ポテンシャルなら、条件(2.14)を1区間の両端で共通に満たす波動関数は隣の区間へ滑らかに繋がります。でも、いまは動径変数の単一区間を考えています。実は、境界条件(2.13)または(2.14)を満たす ψ_i の1次結合はすべて ψ_i と同じ境界条件を満たし、この \hat{H} の定義域に入るので、同じ定義の \hat{H} をこれら1次結合に自由に施せる利点が(2.13)や(2.14)にはあるのです。

さらに、もう一つ好都合な事情があります。 ϕ も ψ も式(2.13)を満たせば式(2.12)はゼロになります。 ϕ も ψ も同じ定数で条件(2.14)を満たせば $r=R$ で $\phi^*/\phi^* = \phi'/\phi = \psi'/\psi$ で、やはり式(2.12)はゼロです。いずれにせよ、 \hat{H} はエルミート関係式(2.3), (2.4)を満たし、定義域内では \hat{H} はエルミートで、固有値はすべて実数です。これが境界条件(2.13), (2.14)の第二の利点です。しかし、区間 $0 \leq r \leq R$ の勝手な関数、境界条件の異なる関数では式(2.12)は一般にゼロでなく、エルミート関係式は満たされません。

ハミルトニアンの固有関数 ψ_i 全体は完全系を成すと言います。ということは、区間 $0 \leq r \leq R$ での勝手な関数 φ が

$$\varphi = \sum_i c_i \psi_i \quad (2.15)$$

と固有関数展開できると考えられます。ただし、1次結合 φ は必ず ψ_i と同じ条件(2.13)か(2.14)を満たすのですから、逆に、境界条件が違う φ , \hat{H} の定義域をはみ出す φ は、端点 $r=R$ では式(2.15)のように書けません。 $r < R$ での展開(2.15)で極限 $r \rightarrow R$ を取れば $\varphi(R)$ になるのですが、端点で突然、値が跳んでしまうのです。

無限区間は少しやっかいです。束縛状態型(規格化可能)関数 φ 全体は数学でヒルベルト(Hilbert)空間と称するある種の関数集団の一例を成し、各 φ はハミルトニアンの固有関数である離散状態 ψ_i と連続状態 ψ_E 全体で作られる完全系で展開できます。このとき、連続状態につい

ては式(2.15)の和を積分と解釈し、固有関数の規格直交性もデルタ関数に基づいて解釈し直す必要があります。束縛状態型でない一般の関数についてはこの展開は保証されません。

2.6 固有関数の直交性：前章の宿題

同じハミルトニアン \hat{H} の二つの固有関数はその固有値が異なれば直交すると第1.6節で証明しました。他方、この証明に反して連続状態波動関数は直交しないことを指摘しました。事情はもうお分かりですね。式(1.14)の導出に使った \hat{H} のエルミート性が連続状態では破れるのです。

一方、無限区間での積分が心配なら、大きな有限区間での積分につき式(1.14)を示し、積分領域を広げたその極限として無限区間での直交性を導けるだろうと述べました。実際、境界条件(2.13)か(2.14)を満たす固有関数の間ではエルミート関係式(2.3)が成り立ち、第1.6節の証明が保証されます。ただ、第1.3節で述べたように、いかに大きくとも有限サイズの箱に閉じ込めれば無限区間とは異なる事情が生じます。有限区間の離散状態からの単純な無限極限として連続状態を扱う発想は全く間違いなのです。

なお、第1.6節の導出は、必ずしもハミルトニアンでなくとも、勝手なエルミート演算子の固有関数の直交性に適用できる証明法です。

2.7 いつエルミートなのか？

演算子 \hat{A} がハミルトニアン \hat{H} のとき、無限空間では ϕ, ψ のどちらか一方でも束縛状態型ならエルミート関係式(2.3), (2.4)が成り立ちます。両方とも連続状態型なら一般に式(2.3), (2.4)の積分は決まった値をもちません。これは内積 (ϕ, ψ) の事情と似ています。 ϕ, ψ の一方でも束縛状態型ならこの内積は関係式(2.1)を満たす決まった値をもちますが、両方とも連続状態型なら一般に値が決まりません。なお、第2.4節で紹介した演算子 \hat{L} の非エルミート性の議論は、実は、ハミルトニアンとエネルギーとの組み合わせにより、境界条件(2.10)を満たす関数についてなら積分

$(\phi, \hat{L}\psi), (\hat{L}\phi, \psi)$ がしっかり決まるというかなり特殊なケースを扱っていたのでした。

区間 $0 \leq r \leq R$ に閉じ込めた動径波動関数では、 ϕ, ψ とも $r=R$ でゼロか、対数微分(2.14)が共通の実数ならエルミート関係式(2.3), (2.4)は成り立ちます。その極限として $r \rightarrow \infty$ で $\phi^*/\phi \rightarrow \psi'/\psi$ なら無限区間でも成り立ちます。

以上、すべて式(2.11), (2.12)の表面項 $\phi^*\psi' - \phi'^*\psi$ が消えるか否かにかかっています。

動径変数ではなく、例えば座標 x, y, z の有限区間ならば、その下限で波動関数が必ずゼロとは限らないので、式(2.3), (2.4)の保証には下限での表面項もゼロとの要請が必要です。

変数がいくつもある多体系でも、各距離変数について表面項を調べれば、ここまでの話と同じような議論が成り立ちます。

運動量演算子

$$\hat{p}_\alpha = -i\hbar\partial/\partial\alpha \quad (\alpha = x, y, z, r) \quad (2.16)$$

については、式(2.12)に相当する関係式

$$(\phi, \hat{p}_r\psi)_R - (\hat{p}_r\phi, \psi)_R = -i\hbar[\phi^*\psi]_{r=R} \quad (2.17)$$

などが得られます。ここで ϕ か ψ が $r=R$ でゼロなら右辺はゼロで、 \hat{p}_r はエルミート関係式(2.3), (2.4)を満たします。無限空間では、 ϕ か ψ が束縛状態型なら式(2.3), (2.4)を満たしますが、両方とも連続状態型なら一般には満たしません。微分演算子には気を付けなければいけません。

入門的教科書にはほとんど指摘がないものの、連続状態の理論は束縛状態と相当違うくせ者であることを第1, 2章で述べてきました。ある証明に使った仮定、前提が今の場合にも本当に当てはまるのか、常に注意を払うことが大切です。

付録 2A 証明：物理量演算子はエルミート

教科書によっては、物理量演算子 \hat{A} にエルミート性を要請することにより勝手な規格化波動関数 χ に対する期待値 $\langle \hat{A} \rangle_\chi = \langle \chi, \hat{A}\chi \rangle$ が実数になるようにしています(第2.2節).²⁾しかし、逆に $\langle \hat{A} \rangle_\chi$ が必ず実数であるという物理的にごく自然

な要請をすれば、その帰結として \hat{A} のエルミート性が簡単に導けることをここで示します。¹⁾

χ が二つの状態の重ね合わせ $\phi + \psi$ だとすると、

$$\langle \hat{A} \rangle_\chi = \langle \hat{A} \rangle_\phi + \langle \hat{A} \rangle_\psi + \langle \phi, \hat{A} \psi \rangle + \langle \psi, \hat{A} \phi \rangle,$$

$$\langle \hat{A} \rangle_\chi^* = \langle \hat{A} \rangle_\phi^* + \langle \hat{A} \rangle_\psi^* + \langle \phi, \hat{A} \psi \rangle^* + \langle \psi, \hat{A} \phi \rangle^*.$$

この両式は左辺も右辺第1, 2項も等しいので、

$$\langle \phi, \hat{A} \psi \rangle + \langle \psi, \hat{A} \phi \rangle = \langle \phi, \hat{A} \psi \rangle^* + \langle \psi, \hat{A} \phi \rangle^*. \quad (2A.1)$$

ψ は勝手な関数なのでこれを $i\psi$ に置き換えれば、

$$\langle \phi, \hat{A} \psi \rangle - \langle \psi, \hat{A} \phi \rangle = -\langle \phi, \hat{A} \psi \rangle^* + \langle \psi, \hat{A} \phi \rangle^*. \quad (2A.2)$$

式(2A.1), (2A.2)を辺々加え合わせれば

$$\langle \phi, \hat{A} \psi \rangle = \langle \psi, \hat{A} \phi \rangle^*, \quad (2A.3)$$

つまり、式(2.4)が勝手な ϕ, ψ について成り立ち、 \hat{A} はエルミートであると証明されました。

付録 2B 積分の差と表面項

動径変数 r の関数 f, g につき部分積分公式

$$\int_0^a f'g \, dr = [fg]_0^a - \int_0^a fg' \, dr \quad (2B.1)$$

で $f = \psi'$, $g = \phi^*$ とした式と ψ, ϕ^* を交換した式

$$\int_0^a \psi''\phi^* \, dr = [\psi'\phi^*]_0^a - \int_0^a \psi'\phi^{*'} \, dr,$$

$$\int_0^a \phi^{*''}\psi \, dr = [\phi^{*'}\psi]_0^a - \int_0^a \phi^{*'}\psi' \, dr$$

の差を取り、境界条件 $\phi(0) = \psi(0) = 0$ を使うと

$$\begin{aligned} \int_0^a [\phi^*\hat{L}\psi - (\hat{L}\phi)^*\psi] \, dr &= \int_0^a [\phi^*\psi'' - \phi^{*''}\psi] \, dr \\ &= [\phi^*\psi' - \phi^{*'}\psi]_0^a = [\phi^*\psi' - \phi^{*'}\psi]_{r=a} \end{aligned} \quad (2B.2)$$

と、最左辺の積分 (\hat{L} は式(2.9)で定義) は最右辺の関数の積分上限での値(表面項)で表せます。

第 2 章 文献

- 1) 江沢洋 [1], §6.3.
- 2) B. H. Bransden and C. J. Joachain [4], §2.2.
- 3) C. Cohen-Tannoudji et al. [10], §II.B.
- 4) L. I. Schiff [5], §22.
- 5) 砂川重信 [2], §2.3.
- 6) B. H. Bransden and C. J. Joachain [4], §12.4.
- 7) L. I. Schiff [5], §37.

¹⁾漸近形を $r \rightarrow \infty$ と簡便表記することもあり、無限大極限と勘違いする初学者もときにいます。

3 非弾性散乱だけ起こることはない

－ 流れの保存と非保存

3.1 散乱は入射波を削らないのか？

ポテンシャル散乱の量子論を学び始めたとき、大きい有限な動径距離 r での波動関数の漸近形^{*1}

$$\psi(\mathbf{r}) \sim \exp(ikz) + f(\theta, \phi)r^{-1}\exp(ikr) \quad (3.1)$$

に皆さん、大いに悩んだことでしょう。第1項は散乱がないときの入射平面波です。散乱が起こると第2項の球面波が忽然と生じ、その振幅 $f(\theta, \phi)$ が微分断面積 $|f|^2$ を与えます。その散乱は入射波の一部が弾き飛ばされて起こるはずなのに、入射波は何ら変わっていません。散乱の分、入射波が削り取られてなんかいないじゃないですか！散乱波はいったいどこから湧き出たんですか？

これは粒子数保存の問題でしょう。しかし、散乱の量子論では粒子群の流れを波動関数が表し、粒子数保存に相当する概念は確率の流れの保存という形で導かれます。その観点から、漸近形(3.1)に問題はないのでしょうか？

ポテンシャル場による散乱では弾性散乱しか起こりませんが、一般の衝突過程ではエネルギー条件が許せば非弾性散乱も起こり得ます。すると入射ビームは衝突後、弾性散乱、非弾性散乱、非散乱の三成分に別かれます。これらの流れの総和が入射流量に等しければ、どんな別かれ方でも構わないはずですが、ところが、非弾性散乱が起こるときには弾性散乱が決してゼロにはならない、ゼロになれば流れの保存則が破れてしまうという不思議な事実があります(第3.2節)。

流れの保存はいつでも必ず成り立つのでしょうか？例えば、陽電子は電子と出会えば対消滅してしまいます。そうすれば、陽電子衝突で入射陽電子ビームの流れは保存されないはずですが、陽電子消滅は非相対論的量子論の現象ではないのだから、流れの保存則が出てきてしまうシュレーディンガー方程式で記述しようとするこ自体、無謀な試みだということでしょうか？

流れの保存則を理論的に導くには何か前提条件が必要なのでしょうか？もしそうなら、その条件を故意に破ってみたら新しいことが分からないでしょうか？例えば、陽電子消滅を非相対論的量子論の枠内で表せないでしょうか？

この章ではこれら流れの保存則にまつわるいくつかの話題を取り上げます。

3.2 非弾性散乱は必ず弾性散乱を伴う

球対称ポテンシャル $V(r)$ による散乱を考えましょう。角度方向の力は働かないので、角運動量子数 l は保存され、各部分波 l は他の部分波と混ざりません。各動径波動関数の漸近形は二つの独立な漸近的自由運動波動関数の1次結合

$$\phi_l(r) \sim e^{-i(kr-l\pi/2)} - S_l e^{+i(kr-l\pi/2)} \quad (3.2)$$

で表せます。その物理的意味は、単位振幅の内向き球面波 $e^{-i(kr-l\pi/2)}$ が遠くから場 $V(r)$ の中心に向かって入射すると、外向き球面波 $e^{+i(kr-l\pi/2)}$ が振幅 S_l で遠くへ出て行くということです。この振幅を散乱行列、 S 行列と呼びます。

確率の流れは保存するという一般則(第3.3節)のため、内向き波が単位振幅で入ってくれば、外向き波も必ず単位振幅で出て行くので、 $|S_l|=1$ です。そこで、パラメータ δ_l を導入して

$$S_l = \exp(2i\delta_l) \quad (3.3)$$

と書いてみると、式(3.2)は $e^{i\delta_l}[e^{-i(kr-l\pi/2+\delta_l)} - e^{+i(kr-l\pi/2+\delta_l)}]$ となり、 $\sin(kr-l\pi/2+\delta_l)$ に比例します。原点での境界条件を満たす自由運動動径波動関数の漸近形は $\sin(kr-l\pi/2)$ に比例することが知られているので、¹⁻³⁾ 散乱が起こらなければ $\delta_l=0$ 、 $S_l=1$ であることが分かります。 δ_l は散乱により初めて起こる動径波動関数の漸近的位相のずれで、 S_l の1からのずれが散乱効果を表します。実際、部分波散乱振幅は S_l-1 に比例し、部分波断面積 σ_l は

$$\sigma_l \propto |S_l-1|^2 = |e^{i\delta_l}(e^{i\delta_l} - e^{-i\delta_l})|^2 = 4 \sin^2 \delta_l \quad (3.4)$$

と書けます。^{1,2)}

もしも非弾性散乱が起こればそのチャンネルに確率の流れの一部が奪われ、 $|S_l|<1$ となります(第3.6節最後参照)。そんな S_l は絶対に S_l-1 をゼロにできず、式(3.4)の部分波断面積をゼロにできません。非弾性散乱が起こるなら必ず弾性散乱も起こるのです。⁴⁻⁷⁾ そうです、非男性産卵があるならば、必ず男性産卵もあるはずです!?

非弾性散乱の標準的理論、緊密結合法(チャンネル結合法)をご存じの方はこれに異議があるかも知れません。本来、弾性散乱しか扱えないはずのポテンシャル散乱理論で強引に $|S_l|<1$ として非弾性散乱効果を表したふりをしているだけではないかと。そこで、少し補足しておきます。

チャンネル間結合は単位振幅内向き波が入るチャンネル i と違うチャンネル j にも外向き波を生み、その振幅を S_{ji} として多チャンネル S 行列の第 i 列 S_{ji} ($j=1, 2, \dots$) が定義されます。チャンネル i に入った流れが全チャンネルの外向きの流れで保存されるには $\sum_j |S_{ji}|^2 = 1$ でなければなりません。ゼロでない振幅の外向き波がたとえ一つの非弾性チャンネル j ($\neq i$) にでもあれば、必ず $|S_{ii}|^2 < 1$ となります。 S_{ii} は内向き波と同じチャンネルに出る外向き波の振幅ですから、弾性散乱断面積(またはそのある部分波成分) σ_{el} は $|S_{ii}-1|^2$ に比例し、 $|S_{ii}|^2 < 1$ なら必ず $\sigma_{el} > 0$ になるのです。

3.3 流れの保存則

質量 m の粒子につき、運動量ベクトル演算子 $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ と「速度」演算子 $\hat{\mathbf{v}} = \hat{\mathbf{p}}/m$,⁸⁾ 運動エネルギー演算子 $\hat{T} = \hat{\mathbf{p}}^2/2m = -(\hbar^2/2m)\Delta$ 、ポテンシャル $V(\mathbf{r}, t)$ 、ハミルトニアン \hat{H} を扱います。時間依存シュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi = (\hat{T} + V)\Psi \quad (3.5)$$

の「規格化された」解 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ で決まる二つの量、

$$P(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2, \quad (3.6)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = (\Psi^* \hat{\mathbf{v}} \Psi - \Psi \hat{\mathbf{v}} \Psi^*)/2 \quad (3.7)$$

を考えましょう。 $P(\mathbf{r}, t)$ は確率密度を表し、体積の逆数の次元をもちます。 $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ は確率の流れの密度、あるいは流束(フラックス)と呼ばれる、散

乱理論で基礎的な物理量で、[速度]/[体積]の次元をもちます。つまり、単位時間、単位面積当りの量です。一般に、流束はある面を垂直に横切る粒子、質量、エネルギーなどの流れを単位時間、単位面積当りの強さで表したものです。⁹⁾

連続状態波動関数は規格化できません。でも、これを大きな箱に閉じ込めて規格化すれば、第1,2章で述べたような困難なしに確率密度や流束を扱えます。このとき、規格化定数は箱のサイズに依存し、極端に小さくなりますが、ふつう、流束の絶対値は問題になりません。例えば、式(3.1)では散乱球面波と入射平面波の振幅の比が重要で、全体にどんな定数係数をかけても散乱現象に変わりはないので最も単純な係数を採用します。

式(3.7)がなぜ流束なのか考えるため、ある勝手な閉じた空間 \mathcal{V} 内の全確率の時間変化を調べます。¹⁰⁻¹³⁾ 方程式(3.5)により Ψ の時間微分はハミルトニアン \hat{H} の演算に置き換えられ、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{V}} P(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} &= \int_{\mathcal{V}} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) d\mathbf{r} \\ &= -(i/\hbar) \int_{\mathcal{V}} [\Psi^* (\hat{H}\Psi) - \Psi (\hat{H}\Psi)^*] d\mathbf{r} \\ &= Q_T(t) + Q_V(t). \end{aligned} \quad (3.8)$$

$Q_V(t)$ はポテンシャル V による部分

$$\begin{aligned} Q_V(t) &= -(i/\hbar) \int_{\mathcal{V}} [\Psi^* (V\Psi) - \Psi (V\Psi)^*] d\mathbf{r} \\ &= (2/\hbar) \int_{\mathcal{V}} (\text{Im} V) P(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} \end{aligned} \quad (3.9)$$

です。 V は実数関数のはずだと考えるとその虚部 $\text{Im} V$ はゼロ、したがって、 $Q_V(t)$ もゼロです。

運動エネルギー演算子 \hat{T} による部分 $Q_T(t)$ は付録3Aで変形してあり、その結果(3A.2)を式(3.8)と比べれば、被積分関数同士の等式

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\mathbf{r}, t) = -\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \quad (3.10)$$

を得ます。¹⁰⁻¹³⁾ これは湧き出しも吸い込みもない密度 P 、流束 \mathbf{j} の流体で良く知られた「連続の方程式」、「流れの保存則」と同じ形をしています。そこで、 \mathbf{j} を確率の流れベクトル、確率の流れの密度と解釈してよからうというわけです。¹⁰⁻¹³⁾

ただ、 $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ は正確には測れません。¹²⁾ 確率密度 $P(\mathbf{r}, t)$ を決めるには独立な多数の粒子につき

\mathbf{r} を測ればよいのですが、 $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ を決めるには位置と運動量を同時に正確に測らねばならず、不確定性原理に反するからです。でも、 $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ が位置の変化とともにゆっくり変わるなら十分な精度で決めることができます。 $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ が流束としての物理的意味をもつにはこの条件が必要です。

ハミルトニアンがエルミートなら式(3.8)、第2行の積分はゼロですが、これは大間違いだと前章で述べました。この積分は付録2Bで扱った動径関数 $\phi^* \psi'' - \phi'' \psi$ の積分に似ています。そこで示した積分差を表面項で表す手法を体積積分に焼き直せば、つまり、部分積分により体積積分を表面積分に変えるグリーン(Green)の定理を式(3A.2)の右辺に適用すれば、式(3.8)より

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{V}} P(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = - \int_S j_n(\mathbf{r}, t) dS \quad (3.11)$$

を得ます。¹⁰⁻¹³⁾ 右辺の積分は領域 \mathcal{V} を囲む表面 S 全体に亘り、 j_n はベクトル $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ の各面積素片 dS に立てた外向き法線方向の成分です。右辺の負号に注意すれば、表面 S を通して領域 \mathcal{V} に入ってくる正味の流れ全体が \mathcal{V} 内の確率の増加率に等しいという「確率の流れの保存則」を式(3.11)は表します。これと同等な式(3.10)も流れの保存則を意味することは上で述べた通りです。

ポテンシャル V が時間非依存なら、波動方程式 $\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$ を満たす $\psi(\mathbf{r})$ を使い定義された

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar} \quad (3.12)$$

が時間依存波動方程式(3.5)を満たすことは

$$i\hbar \partial(\psi e^{-iEt/\hbar})/\partial t = E\psi e^{-iEt/\hbar} = \hat{H}\psi e^{-iEt/\hbar}$$

から明らかです。このとき $P(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r})|^2$ で、これは時間に依らないので、式(3.10)も(3.11)もゼロです。したがって、流れの保存則から、「時間非依存のどんな実数ポテンシャルのもとでも、波動関数が表す確率の流れは、どの場所のどんな大きさのどんな形の空間領域でも、その中に入る流束とそこから出る流束は全体として常に平衡を保ち、差し引きゼロである」と言えます。

波動関数(3.12)の時間因子は流束の式(3.7)でも消え、 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ を $\psi(\mathbf{r})$ に置き換えることができ、 $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ を $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ と書けます。

3.4 散乱波はどこから湧き出たか？

最初の疑問に戻ります。散乱波はどこから湧いて出たのか、それは流れの保存則を破らないのか。実は第0.10節で基本的な考え方は述べました。ここでは波動関数が表す流束 $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ の式に基づいてこれを詳しく調べます。漸近形(3.1)を式(3.7)に代入すると流束は三つの項に別れます。 $\Psi(\mathbf{r}, t)$, $\Psi^*(\mathbf{r}, t)$ の、つまり $\psi(\mathbf{r})$, $\psi^*(\mathbf{r})$ の入射波部分から生じる $\mathbf{j}^{\text{inc}}(\mathbf{r})$, 散乱波から生じる $\mathbf{j}^{\text{sc}}(\mathbf{r})$, そして二つの波の干渉による $\mathbf{j}^{\text{int}}(\mathbf{r})$ です。

$\mathbf{j}^{\text{inc}}(\mathbf{r})$ を計算すると、平面波の進行方向を向く単位体積当り大きさ $\hbar k/m$ (これを以後、 v と書きます⁸⁾) のベクトルになります。

ここで、大きな有限半径 r の球面 S を考えます。その上を法線方向に出ていく $\mathbf{j}^{\text{sc}}(\mathbf{r})$ の動径成分 $j_r^{\text{sc}}(\mathbf{r})$ は、 r の負べき r^{-n} の高次項を無視すると

$$j_r^{\text{sc}}(\mathbf{r}) = (v/r^2)|f(\theta, \phi)|^2 \quad (3.13)$$

となります。また、干渉項の動径成分 $j_r^{\text{int}}(\mathbf{r})$ は

$$j_r^{\text{int}}(\mathbf{r}) = (v/r)(2-\xi) \text{Re}[f(\theta, \phi)e^{ikr\xi}] \quad (3.14)$$

が主要項です。^{14,15)} ここで $\xi \equiv 1 - \cos\theta$, また Re は [] 内の実部を取るという意味です。

散乱によって生まれた流れが微小立体角 $d\omega$ を見込む S 上の微小面積 $dS = r^2 d\omega$ を通る量 $d\sigma^{\text{ph}}$ は単位入射流束当り $d\omega$ 当り

$$\frac{d\sigma^{\text{ph}}}{d\omega} = \frac{r^2[j_r^{\text{sc}}(\mathbf{r}) + j_r^{\text{int}}(\mathbf{r})]}{|\mathbf{j}^{\text{inc}}(\mathbf{r})|} = \frac{d\sigma^{\text{sc}}}{d\omega} + \frac{d\sigma^{\text{int}}}{d\omega} \quad (3.15)$$

です。これを「物理的」微分断面積と呼びましょう。これは原理的に別々に測定できない、単に数式上区別した2成分、散乱波による第1項 ($d\sigma^{\text{sc}}/d\omega$) と干渉による第2項 ($d\sigma^{\text{int}}/d\omega$) の和になります。

しかし、 $j_r^{\text{int}}(\mathbf{r})$ の指数関数の肩は純虚数で大きな r がかかり、 θ がわずかに変化するだけで $j_r^{\text{int}}(\mathbf{r})$ は激しく振動するので、狭い θ の範囲で平均してもゼロになります。現実の測定ではこの激しい振動を追うことはできず、 $j_r^{\text{int}}(\mathbf{r})$ の観測値は事実上ゼロになります。例外は $kr\xi$ が小さいところ、例えば $1 > kr\xi \simeq kr\theta^2/2$ のときで、

$$\theta < \theta^{\text{int}} \equiv (kr)^{-1/2} \quad (3.16)$$

ほどの極めて小角では干渉項を無視できません。しかし、それより大きな散乱角では

$$\frac{d\sigma^{\text{ph}}}{d\omega} \simeq \frac{d\sigma^{\text{sc}}}{d\omega} = \frac{r^2}{v} j_r^{\text{sc}}(\mathbf{r}) = |f(\theta, \phi)|^2 \quad (3.17)$$

としてよいでしょう。この $d\sigma^{\text{sc}}/d\omega$ を通常、単に(弾性散乱)微分断面積と称します。散乱流の観測点 r をいかに遠くしても、式(3.17)が使えるためには必ず $\theta \simeq 0$ が除外される点^{14,16-18)} は重要なので、次章でさらに詳しく論じます。平面波と球面波の干渉が $\theta \simeq 0$ でしか見られないのは平面波が前方 ($\theta = 0$) にしか出ないからです。

時間非依存ポテンシャルなら、どんな空間であれ、出入りする流れは正味ゼロだと前節で示しました。一様な入射流束 $\mathbf{j}^{\text{inc}}(\mathbf{r})$ だけなら明らかにこの保存則を満たすので、球面 S を通る流束全体の出入りがつり合うには、散乱項 $\mathbf{j}^{\text{sc}}(\mathbf{r})$ と干渉項 $\mathbf{j}^{\text{int}}(\mathbf{r})$ の球面 S に亘る積分が打ち消し合わねばならず、したがって、式(3.15)を全立体角に亘り積分した「物理的」積分断面積は必ず

$$\sigma^{\text{ph}} = \sigma^{\text{sc}} + \sigma^{\text{int}} = \int_S \frac{j_r^{\text{sc}}(\mathbf{r}) + j_r^{\text{int}}(\mathbf{r})}{v} dS = 0 \quad (3.18)$$

を満たします。球面 S をいかに大きくしようが、 $r \rightarrow \infty$ としようがこれは成り立ちます。

干渉項が効くのは $\theta \simeq 0$ ($\xi \simeq \theta^2/2$) だけなので式(3.14)で $f(\theta, \phi)$ は $f(\theta=0)$ で置き換えてよく、さらに、 $dS = r^2 d\omega = 2\pi r^2 \sin\theta d\theta \simeq 2\pi r^2 d\xi$, $2-\xi \simeq 2$ なので、球面 S から出る干渉項の流束は

$$\int_S j_r^{\text{int}}(\mathbf{r}) dS = -\frac{4\pi\hbar}{m} \text{Im} f(\theta=0), \quad (3.19)$$

散乱項(3.13)の S から出る流束は

$$\int_S j_r^{\text{sc}}(\mathbf{r}) dS = v \int |f(\theta, \phi)|^2 d\omega = \frac{\hbar k}{m} \sigma^{\text{sc}} \quad (3.20)$$

と積分されます。

流れの保存則(3.18)が表していることは、入射流束が $\theta \simeq 0$ の負の干渉項(3.19)により減らされて通常積分断面積 σ^{sc} を形作る四方八方への散乱の流れ(3.20)に充てられているということ、散乱が起ころうが起ころまいが、どんな散乱が起ころうが、球面 S を出入りする正味の流れに変わりはないということです。^{3,14,15)}

3.5 光学定理の物理的含蓄と拡張

流れの保存則(3.18), つまり, (3.19)+(3.20) = 0 から直ちに導かれる関係式

$$\sigma^{\text{sc}} = \int f(\theta, \phi) f^*(\theta, \phi) d\omega = \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(\theta=0) \quad (3.21)$$

を光学定理と呼んでいます. 右辺の前方干渉流が入射流束を削り取って左辺の散乱断面積を作り出すことを表す流れの保存則の一表現で, 物理的に含蓄のある定理です.

球対称場での光学定理は, 全断面積 σ^{sc} と散乱振幅 $f(\theta)$ を部分波ごとに位相のずれで表す式を比べれば確認できます.^{1-3, 15, 19)} でも, その確認だけでは単に数式上の関係が知れたというに過ぎません. その関係がより一般的な流れの保存則の帰結なのだという理解が大切です. また, 非球対称場, さらに非弾性散乱や反応(構成粒子の組替え)が起こる場合でも, 式(3.21)の σ^{sc} を全過程の断面積の総和 σ_{tot} に置き換え, 弾性散乱振幅を $f(\theta)$ とした拡張光学定理が流れの保存則から導けます.²⁰⁾ この場合, 断面積は位相のずれでは表せないのです, 流れの保存から導くしかないのですし, それこそが物理の本質です.

これがなぜ「光学」定理なのか説明してある教科書をまず見ません. そこで, 歴史的事情を少し述べます.²¹⁾ 実は, これに相当する波動光学の式をレーリー(Rayleigh)卿がすでに1871年に示しており, 1908年に光の散乱理論の発展を踏まえ, ミー(Mie)がより明確な表式に表しました. 光の散乱波 $\psi(\mathbf{r})$ の漸近形(3.1)が表すエネルギーの流れ($\propto |\psi|^2$)を論じたファンデフルスト(van de Hulst)による導出法は物理的示唆に富みます.²²⁾ 標的の正面遠方 z に置かれた半径 R の円形スクリーンA全体に当たる光は, 小角散乱 $\theta \ll 1$, つまり $R \ll z$ の条件で, かつ主な回折ピークをすべて捉えるくらい大きな半径 $R^2 \gg (2\pi/k)z$ を考えると, $\int_A |\psi|^2 ds \simeq \pi R^2 - (4\pi/k) \text{Im} f(\theta=0)$ と計算されます.²²⁾ 第1項は標的がない(平面波のみの)ときの量ですから, 第2項が散乱と吸収による減衰を表し, 正に式(3.21)を示しています.

散乱理論の分野では, これと全く独立に, 球

対称場での式(3.21)をフィーンバーグ(Feenberg)が示しましたが²³⁾ (received 8 September 1932, published 1 April 1932; タイムマシーン!), 当時, ほとんど注目されなかったようです.

1943年にはハイゼンベルグ(Heisenberg)が流れの保存則と同等な S 行列のユニタリー性から, 波数ベクトルが $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$ と変わる一般の散乱角の弾性散乱振幅 $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ につき, 関係式

$$\int f(\mathbf{k}', \mathbf{k}'') f^*(\mathbf{k}'', \mathbf{k}) d\omega'' = (4\pi/k) \text{Im} f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \quad (3.22)$$

を導きました.²⁴⁾ ここで, 積分変数 ω'' は \mathbf{k}'' の角度部分です. もしも $\mathbf{k}' = \mathbf{k}$ ならば, それは散乱角ゼロを意味するので右辺の散乱振幅は前方散乱に対するものになり, また, 左辺は積分断面積になりますから, この式は式(3.21)に帰着します. つまり, 式(3.22)は光学定理の一般化です.

量子力学の教科書[5]で知られる Schiff(Shiff)が1953年の広島講演を記した論文(これは影散乱に関し第5.4節でも紹介します)²⁰⁾ では, 弾性散乱から一般の衝突での σ_{tot} へ式(3.21)が拡張されています. その少し前から光学分野での研究が量子論分野でも意識され, 徐々に光学定理の呼び名が広まっていったようです.²¹⁾ レーリー卿から始まる詳しい歴史, 光学定理を論じている教科書, いない教科書, 呼び名の変遷, また, 光学定理から導かれる理論的帰結の数々を, 散乱理論の教科書で知られるニュートン(Newton)が解説しています.²¹⁾

$\theta = 0$ で弾性散乱振幅を計算すれば, すべての非弾性散乱と反応性(組替)衝突を含む総和断面積 σ_{tot} が光学定理により直接得られます. 逆に, 計算または測定から決めた σ_{tot} との整合性の確認にも光学定理を使えます. また, 複素散乱振幅 f を $f_{\text{Re}} + if_{\text{Im}}$ と書けば $|f|^2 = |f_{\text{Re}}|^2 + |f_{\text{Im}}|^2 \geq |f_{\text{Im}}|^2$ ですから, 断面積間に成り立つ不等式 $\sigma_{\text{tot}} \leq (4\pi/k) [d\sigma^{\text{sc}}(\theta=0)/d\omega]^{1/2}$ が導けます. この右辺は原理的に直接観測不能ですが(第3.4節), $\theta > 0$ での観測値の $\theta \rightarrow 0$ への外挿でふつうは代用できます(第4.2節). 一般化光学定理(3.22)を使って微分断面積から散乱振幅の位相を知ることができるかなどの研究も行われています.²¹⁾

3.6 複素ポテンシャルと流れの非保存

ポテンシャル V は実数だから式(3.9)の $Q_V(t)$ はゼロだとして流れの保存則(3.10), (3.11)を導きました。しかし、仮に V に虚部があれば、式(3.8)により式(3.11)の右辺には $Q_V(t)$ が、また式(3.10)にも同質の項が加わり、保存則が破れます。ということは、もしも人為的に虚部 V_{Im} を導入すれば、流束の生成($V_{\text{Im}} > 0$), 吸収(消滅)($V_{\text{Im}} < 0$)を現象論的に表せるはずで^{4-7, 12, 25}。

V_{Im} による吸収断面積を σ_{abs} とすれば流束損失レート $-Q_V$ は $|\mathbf{j}^{\text{inc}}|\sigma_{\text{abs}}$ なので、波動関数 ψ が単位振幅の入射平面波をもてば、式(3.9)より

$$\sigma_{\text{abs}} = -Q_V/|\mathbf{j}^{\text{inc}}| = -(2/\hbar v)(\psi, V_{\text{Im}}\psi) \quad (3.23)$$

と書けます。陽電子衝突では陽電子消滅は標的の内各電子 i との距離 \mathbf{r}_i がゼロのときに起こるので、 $V_{\text{Im}} \propto \sum_i \delta(\mathbf{r}_i)$ です。ただし、式(3.23)の ψ は陽電子-標的系全体の波動関数になります。

V が複素量ならハミルトニアンは非エルミートで、その固有エネルギーも複素数です。それを例えば $E_r - i\Gamma/2$ と書けば、 Γ はその状態のエネルギーのあいまいさ、 \hbar/Γ が寿命を表すことが知られています(第9.4節, 9.8節)。そこで、適切な V_{Im} を使えば、例えばポジトロニウム(電子-陽電子束縛系)の諸状態の寿命を計算できます(第9.4節)。ただし、現実のエネルギー観測値が複素数であるはずはなく、複素エネルギーは現実の物理系の状態に関する物理的理解を深めるための便宜的な方便です。実際、複素エネルギー状態の波動関数は遠方で非物理的に無限大に発散します。この辺の議論や実数エネルギー状態との関係については第9章をご覧ください。

非弾性散乱や反応により弾性散乱チャネルから流束が失われる効果は、ポテンシャル場による散乱の理論に V_{Im} を導入すれば形式的に表せ、その断面積が式(3.23)で得られます。複素ポテンシャル下では、原点から外向きに動径方程式を解いた波動関数も位相のずれ δ_l も複素量になり、 $|S_l| = |\exp(2i\delta_l)| \neq 1$ となるので、第3.2節の議論とつじつまが合います。^{4-7, 12, 25}

付録3A 確率の変化速度

本文、式(3.8)の $Q_T(t)$ は

$$\begin{aligned} Q_T(t) &= \frac{-i}{\hbar} \int_{\mathcal{V}} [\Psi^* \hat{T} \Psi - \Psi \hat{T} \Psi^*] d\mathbf{r} \\ &= \frac{-i}{2m\hbar} \int_{\mathcal{V}} [\Psi^* \hat{\mathbf{p}}^2 \Psi - \Psi \hat{\mathbf{p}}^2 \Psi^*] d\mathbf{r} \\ &= \frac{-i}{2\hbar} \int_{\mathcal{V}} \hat{\mathbf{p}} \cdot [\Psi^* \hat{\mathbf{v}} \Psi - \Psi \hat{\mathbf{v}} \Psi^*] d\mathbf{r} \quad (3A.1) \end{aligned}$$

と変形できます。最後の式の大括弧内は式(3.7)の流束ベクトル $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ の2倍なので

$$Q_T(t) = -\int_{\mathcal{V}} \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}. \quad (3A.2)$$

と書くことができます。

第3章 文献・注

- 1) 砂川重信 [2], §3.2.
- 2) B. H. Bransden and C. J. Joachain [4], §12.3.
- 3) L. I. Schiff [5], §19.
- 4) B. H. Bransden and C. J. Joachain [4], §12.8.
- 5) 砂川重信 [2], §3.5.
- 6) L. I. Schiff [5], §20.
- 7) L. D. Landau and E. M. Lifshitz [8], §142.
- 8) 運動量を質量で割ったので、古典論の速度を連想した表記。その妥当性は第7章で議論する。
- 9) これを流束密度と呼び、ある面積に亘ってそれを積分したものを流束と呼ぶ流儀もある。
- 10) 江沢洋 [1], §5.3.
- 11) B. H. Bransden and C. J. Joachain [4], §2.2.
- 12) L. I. Schiff [5], §7.
- 13) L. D. Landau and E. M. Lifshitz [8], §19.
- 14) 砂川重信 [2], §2.3.
- 15) 高柳和夫 [3], §2-3.
- 16) L. I. Schiff [5], §18.
- 17) B. H. Bransden and C. J. Joachain [4], §12.2.
- 18) L. D. Landau and E. M. Lifshitz [8], §123.
- 19) M. S. Child [7], §3.2.
- 20) L. I. Schiff, Prog. Theor. Phys. **11**, 288 (1954).
- 21) R. G. Newton, Am. J. Phys. **44**, 639 (1976).
- 22) H. C. van de Hulst, Physica **15**, 740 (1949).
- 23) E. Feenberg, Phys. Rev. **40**, 40 (1932).
- 24) W. Heisenberg, Z. Phys. **120**, 513, 673 (1943).
- 25) 砂川重信 [2], §2.5.

4 まやかしのゼロ度弾性散乱断面積

ー クーロン散乱も発散しない

4.1 小角散乱の立ち上がり

荷電粒子同士の弾性衝突やクーロン場による粒子の散乱、「クーロン散乱」の量子論的積分断面積 σ^{sc} (前章に従う記法) は無限大です。¹⁻⁶⁾ 微分断面積が $d\sigma^{\text{sc}}/d\omega \propto \sin^{-4}(\theta/2)$ に従い前方 $\theta \rightarrow 0$ で強く発散するためです(第0.2節). 前方散乱は散乱中心(標的)から遠く離れた領域を通る入射波成分の散乱に当たります. 一般に長距離力は前方散乱を強めますが, 極端な長距離力のクーロン力はいかに遠くを通る波をもわずかに散乱し, 小角散乱が大量に起こるのです. ポテンシャル $\propto r^{-2}$ による散乱では $d\sigma^{\text{sc}}/d\omega \propto \sin^{-2}(\theta/2)$ と弱い発散を示しますが, やはり σ^{sc} は無限大です.

なお, ポテンシャルのすそ野さえ $\propto r^{-1}$ あるいは $\propto r^{-2}$ なら短距離部分の如何に係わらず前方散乱角分布の形は同じなので, 例えば, 電子(陽電子)-イオン衝突, イオン-イオン衝突等の弾性散乱積分断面積 σ^{sc} も運動量移行断面積 $\sigma_m = \int (1 - \cos \theta)(d\sigma^{\text{sc}}/d\omega) d\omega$ も発散します.

短距離力でも強い前方散乱の例が見られます. 剛体球による散乱です. ドブロイ(de Broglie)波長が極端に短い高エネルギー極限 $E \rightarrow \infty$ でなら古典近似が成り立つはずという早とちりがここでは見事に覆され, 角分布は古典論のように等方的ではなく, $\theta \rightarrow 0$ で急増します. このピークは $E \rightarrow \infty$ でいくらでも狭く高くなりますが, その発散は σ^{sc} を古典論の2倍, つまり有限値に止めます. 小角ピークは波の回折効果による「影散乱」として説明されています(第4.4節, 第5章).

この散乱で古典近似が悪いのは, 不確定性原理により古典論が小角散乱で破綻するからです(第4.3節). いくら遠方でもゼロにならないポテンシャルでは, それが r の増加とともにいかに急激に減ろうとも, 必ず古典積分断面積は無限大になってしまうというとんでもない事実も, この小角破綻が原因です. なお, クーロン散乱の古典論の特殊な事情は第4.3節で説明します.

でも, クーロン散乱や影散乱が $\theta \simeq 0$ でも本当に観測可能なのでしょうか. 散乱振幅 $f(\theta)$ により微分断面積を $|f(\theta)|^2$ と表す式(3.17)を第3.4節で導く際, それが測定できる条件として $\theta \simeq 0$ を除外する必要がありました. $\theta \simeq 0$ ではどんな思考実験でも $|f(\theta)|^2$ と分離できない干渉流束が付随するからでした. それなら, この原理的に測定不可能な $|f(\theta \rightarrow 0)|^2$ の値に, またその発散にまともな意味があるのでしょうか?

実際, この干渉流束をしっかりと考慮に入れて現実にかかる散乱を調べると, (非相対論の範囲内)あまり高エネルギーになり過ぎると剛体球散乱の σ^{sc} の半分を担う影散乱が観測できず, あとの半分は古典論で再現できるのです(第4.4節).

小角散乱には神経を使うべき点がいろいろあります. 第4章はそこに焦点を合せます.

4.2 物理的意味を失う前方散乱断面積

まず, 念のため, 発散の明らかな一側面から注意喚起です. ポテンシャル散乱の波動関数の漸近形(3.1)で, 入射平面波 e^{ikz} は x, y 方向には同一の値で無限に伸びた, 無限に太いビームを表します. ビームの中心軸から無限に離れた部分まで散乱される場合に限って断面積が発散するわけで, 現実の有限径ビーム入射では, 当然, 毎秒無限個の散乱粒子が検出されるわけがありません. では, 現実の有限径ビームを表さない波動関数(3.1)に基づいた理論は荒唐無稽でしょうか. クーロン場という巨大な怪物をそれより小さな径のビームで探っても部分的情報しか得られず, 巨大物体の全体像は掴めません. 探査結果はビーム径に依存します. でも, $\theta \rightarrow 0$ で微分断面積が発散しない場合なら, 量子論で扱う場の実質的な大きさはマイクロサイズで, それに比べて巨大なマクロサイズのビームを平面波として理想化しても, まず問題は生じません.

なお, クーロン散乱は非常に特殊です. その波動関数はいかに大きな r でも式(3.1)に近づきません(第0.6節).¹⁻⁶⁾ その意味では式(3.1)に基づく以下の議論は, クーロン散乱に関しては厳密

ではありません。でも、概念の説明には支障がないので、正しくてもうるさい式は敢えて避けます。

さて、より本質的な議論に入りましょう。第3.4節の復習になりますが、散乱がなければ漸近形(3.1)の入射波が作る流束 j^{inc} だけが z 方向に流れています。散乱が起こると、これに加え、大きな半径 r の球面 S 上、動径方向に散乱波自身による流束 $j_r^{\text{sc}}(\theta)$ と散乱波と入射波の干渉による流束 $j_r^{\text{int}}(\theta)$ との和が出ていき、この二つは原理的に別々には観測できません。それぞれの流束に相当して形式的に定義された微分断面積成分 $d\sigma^{\text{sc}}/d\omega$ (通常のいわゆる微分断面積) と $d\sigma^{\text{int}}/d\omega$ の和が「物理的」微分断面積 $d\sigma^{\text{ph}}/d\omega$ (3.15) で、これが平面波流束に加えて散乱により新たに θ 方向に出て行く現実の流れを代表します。

ポテンシャルが実数で時間非依存なら、全立体角領域に亘り $d\sigma^{\text{ph}}/d\omega$ を積分した「物理的」積分断面積 $\sigma^{\text{ph}} = \sigma^{\text{sc}} + \sigma^{\text{int}}$ はゼロになることを式(3.18)に示しました。これは、通常定義の積分断面積 σ^{sc} を負の干渉項 σ^{int} が打ち消して全表面 S 上を出入りする現実の流れを差引ゼロにする流れの保存則に基づくもので、クーロン散乱でも、いかに大きな r でも必ず成り立ちます。クーロン散乱のように断面積 σ^{sc} が巨大なら、 σ^{int} は負で巨大になり、これを打ち消します。その意味で、「現実の」断面積 σ^{ph} は、章の副題の通り、「クーロン散乱でも発散しない」のです。干渉項により打ち消される運命にある σ^{sc} の発散は、現実には見られない「数式上だけの発散」と言えます。

散乱球面波と前方だけに出る入射平面波との干渉による流束 $j_r^{\text{int}}(\theta)$ は小角領域(3.16)、つまり $\theta < \theta^{\text{int}} = (kr)^{-1/2}$ を除けば事実上ゼロと見なせ、式(3.17)が成立し、物理的断面積 $d\sigma^{\text{ph}}/d\omega$ は通常微分断面積 $d\sigma^{\text{sc}}/d\omega = |f(\theta)|^2$ に事実上等しいと言えます。しかし、散乱角範囲 $\theta < \theta^{\text{int}} (\ll 1)$ では干渉項が重要で、 $|f(\theta)|^2$ は現実の流れを表しません。全角度方向への散乱 σ^{sc} を流れの保存則に従ってちょうど打ち消す負の流れが前方に凝縮されたものが干渉項で、これが前方への入射流束の一部を削り取って散乱流束に回しているの

です(第3.4節)。そして、これこそが光学定理の物理的意味であることを第3.5節で述べました。

観測点 r をどんどん遠ざければ干渉項 $d\sigma^{\text{int}}/d\omega$ が現れる範囲 $\theta < \theta^{\text{int}}$ をいくらでも狭められます。しかし、例えその角度幅がゼロに収束してもその積分値 σ^{int} は必ず $-\sigma^{\text{sc}}$ になるのですから、極端に鋭く深い負の谷を作ることになります。このように、干渉項 $d\sigma^{\text{int}}/d\omega$ は決して忘れてはならない重要な役割を果たしています。

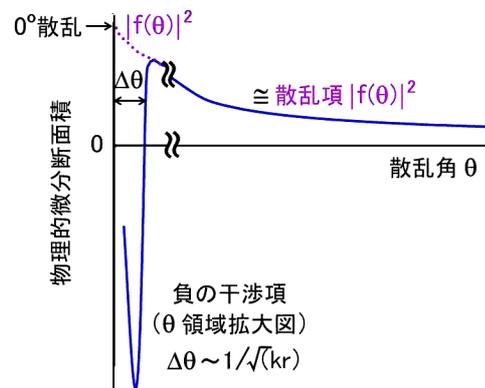


図13. 実線: 散乱により入射ビームに加わる「物理的」微分断面積 $d\sigma^{\text{ph}}/d\omega$ (3.15) の概念図。散乱項と干渉項の和になる。点線: 散乱項 $|f(\theta)|^2$ 。拡大した狭い θ 範囲 $\Delta\theta \simeq (kr)^{-1/2}$ では干渉項が強いが、その外では $d\sigma^{\text{ph}}/d\omega \simeq |f(\theta)|^2$ 。 $r \rightarrow \infty$ で $\Delta\theta \rightarrow 0$ となっても干渉項は無限に深まり、実線の積分は流れの保存により常にゼロである。

以上の考察を踏まえ、物理的断面積を模式的に図13に示します。前方の狭い角度範囲 $\Delta\theta \simeq \theta^{\text{int}}$ の外では干渉項は正負を激しく振動し、図に描けないどころか、平均化されて測定にもかからず、 $d\sigma^{\text{ph}}/d\omega$ は事実上 $|f(\theta)|^2$ と同じです。 $\Delta\theta$ 内では強い干渉により散乱断面積 σ^{sc} を打ち消す、平均として負になる鋭い構造があり、図ではこれを一つだけの鋭い谷として概念的に表してあります。実線を全 θ 領域に亘り積分すればゼロで、クーロン散乱でもこの鋭い谷が発散を抑えて物理的積分断面積をゼロにするのです。

くどういようですが、散乱項 $|f(\theta)|^2$ を点線のように $\theta \rightarrow 0$ まで延長した「ゼロ度散乱微分断面積」は $\theta = 0$ に検出器を置いても観測できません。これは実験技術が未熟なためではなく、これと

干渉項とは「原理的に」分離測定できないのです。 $|f(\theta)|^2$ は $\theta \rightarrow 0$ で観測量としての物理的意味を失います。その意味で、章の見出しで「まやかし」のゼロ度断面積と茶化したのです。意味を失う θ 領域は観測点 r が遠ざかるほど狭まります。しかし、宇宙の彼方でも干渉流束が決して無くなりはないことはすでに述べた通りです。

本章冒頭に述べた前方散乱の発散はこの測定不可能な $|f(\theta \rightarrow 0)|^2$ の話です。ただ、 $|f(\theta)|^2$ の小角での立ち上がり自体は干渉流束が無視できる θ ですで見られます。その $\theta \rightarrow 0$ への数学的外挿にすぎないことを承知の上で $|f(\theta \rightarrow 0)|^2$ の発散を論ずるなら、それはれっきとした散乱「理論」として大いに意味があります。でも、物理的に重要なことは、角分布が前方で急激に立ち上がるため「積分断面積測定値」が現実に測れる最小散乱角に依存し、実質的に決まらないことです。

$|f(\theta)|^2$ が $\theta \rightarrow 0$ で急増しなければ、ごく小さな θ 領域で微分断面積の定義がどうであろうと積分断面積にはほとんど影響しません。その意味では前方散乱の正確な議論はあまり重要でなくなります。この場合、物理的微分断面積は前方散乱ではほとんど干渉項 $d\sigma^{\text{int}}/d\omega$ に等しく、それ以外の散乱角ではほとんど $|f(\theta)|^2$ に等しく、「事実上」両者を分離できます。そして、干渉項が無視できる θ で測られた $|f(\theta)|^2$ を $\theta \rightarrow 0$ へ外挿すれば $|f(0)|^2$ を知ることができます。

漸近形 (3.1) ではポテンシャル場による散乱を想定していますが、多チャネル問題での弾性散乱でも入射波と散乱波は干渉し、本質的に同じ問題が起こります。非弾性散乱や反応性衝突では散乱波は入射波と干渉せず、理論的にはゼロ度微分断面積に何ら問題はありません。なお、荷電粒子同士の衝突でも、非弾性衝突なら通常の微分断面積も前方発散しません。

4.3 小角散乱で破綻する古典論

ポテンシャル散乱理論で古典論が良い近似であるためには、条件

- 1) 粒子の軌道を十分な精度で決められること、
- 2) 散乱角を十分な精度で決められることが必要です。

まず、第1の条件を吟味します。ある粒子が受ける相互作用 $V(\mathbf{r})$ がかなり変わるぐらいの距離 x に比べてはるかに短い $\Delta x \ll x$ の精度でその粒子の位置が決まり、運動量 p_x も十分な精度 $\Delta p_x \ll p_x$ で決まり、 y, z 成分についても同様に言えば、 $V(\mathbf{r})$ を受けつつ運動するその粒子の古典軌道を十分な精度で追えます。不確定性関係の制限から (第7.8節)、この条件は

$$x \gg \Delta x > h/\Delta p_x \gg h/p_x = \lambda_x^D, \text{ 等} \quad (4.1)$$

と書き換えられます。ドブロイ波長 λ_x^D (λ_y^D, λ_z^D) が x (y, z) より十分短くなければ古典近似は成立しません。

次に、散乱角が非常に小さな量子論的散乱は古典近似できないことを示します。その原因は、入射ビーム中の粒子の進行方向に避けられない不確かさ $\Delta\theta$ があり、それと同程度の不確かさを散乱角に与えるからです。

古典散乱で、散乱中心を通る入射ビームの中心軸から測ったビーム内1粒子の距離、衝突パラメータ (impact parameter, 衝突径数^{*1}) を b 、運動量の進行方向成分を p 、それに垂直な成分を p_\perp とします。量子論では、ほぼゼロの p_\perp にも b にも不確定性関係 $\Delta p_\perp \Delta b > h$ に依るあいまいさがあり (第7.8節)、入射方向の不確かさ $\Delta\theta$ は、

$$\Delta\theta = \Delta p_\perp / p > h/(p\Delta b) \quad (4.2)$$

を満たします。古典近似条件は θ と b の相対的不確かさが小さいこと ($\Delta\theta \ll \theta$, $\Delta b \ll b$) で、

$$\theta \gg \Delta\theta > h/(p\Delta b) \gg h/(pb) = \lambda^D/b \simeq (kb)^{-1} \quad (4.3)$$

となり、^{7,8)} ここでもドブロイ波長 $\lambda^D = h/p$ が古典条件に関わります。この条件を満たさない小角散乱では古典論が破綻します。

小角散乱に効くのは大きな b での散乱で、 θ に対する条件 (4.3) の要求は少々わかりにくいかも

^{*1}parameter の訳語「径数」は前世紀の遺物、今や衝突径数と幾何学のリー群の理論ぐらいでしょう。

知れません。長距離型漸近相互作用 $\propto r^{-s}$ では $b \propto (E\theta)^{-1/s}$ となり、古典条件 (4.3) は

$$\theta^{(s-1)/s} \gg \lambda^D E^{1/s} \quad (4.4)$$

と書き換えられます。クーロン力 ($s=1$) では、これは θ に対する条件にはならず、特殊であることがわかります。

$V(r)=C/r$ では、計算で得られた b - E 関係式と不等式 $\cot x < x^{-1}$ を使うと $b=(|C|/2E) \cot(\theta/2) < |C|/E\theta$ となり、これと式 (4.3) から θ に依らない条件式 $|C| \gg E/k$ が得られます。⁷⁾ 低速衝突ほど古典近似が良いという結果です。ランダウ-リフシツ (Landau-Lifshitz) も量子論微分断面積の表式が古典近似できる条件のより詳しい考察からこれと同じ条件式に達しています。⁸⁾ また、シッフは条件 1) から式 $|C|^{1/2} \gg (E/k)^{1/2}$ を導いています。²⁾ 実際には、これらの条件式を満たさないほど弱いクーロン力でも必ず古典微分断面積が量子論的に正しいラザフォード公式になぜか一致してしまいます (第 6.1 節)。

4.4 消えても消えない剛体球断面積

半径 a の剛体球は、入射波がその中に入れず、その外では力を受けないので、ポテンシャル

$$V(r) = \begin{cases} +\infty & (r < a) \\ 0 & (r > a) \end{cases} \quad (4.5)$$

で表せます。動径波動関数は $r=a$ でゼロで、そこから自由運動が始まり、 s 波なら自由粒子の動径関数 $\sin kr$ を a だけ押し出した $\sin\{k(r-a)\}$ になり、したがって位相のずれ $\delta_0(k)$ は $-ka$ です。

短距離型ポテンシャルによる低エネルギー散乱では積分断面積は s 波だけでほとんど決まってしまう (第 0.2 節)、剛体球 (4.5) では $k \rightarrow 0$ で

$$\sigma^{\text{sc}}(k) \simeq (4\pi/k^2) \sin^2 \delta_0(k) \quad (4.6)$$

$$\rightarrow 4\pi\delta_0^2/k^2 = 4\pi a^2 \quad (4.7)$$

と古典論の 4 倍になります。付録 4A に示す量子因子 4 が仮になければ古典論に一致しますが、低エネルギー散乱で古典論と比べる意味はありま

せん。 $4\pi a^2$ になる物理的理由など論じない教科書がふつうですが、例外もあります (付録 4B)。

第 0.2 節、式 (0.7) で定義された散乱長は

$$A = -\lim_{k \rightarrow 0} \tan \delta_0(k)/k \quad (4.8)$$

と書き直せますから、剛体球散乱では $A=a$ と分かります。

前節で述べたポテンシャル散乱の古典近似成立条件 1) は、ポテンシャルがかなり変わるぐらいの距離 ρ に比べてドブロイ波長 λ^D がはるかに短いことでした。クーロンポテンシャル $V_C(r)=C/r$ なら低エネルギー散乱でも古典近似で正しい微分断面積が再現されるのは、距離に対する $V_C(r)$ の変化が非常に遅いため、実効的な ρ が極端に大きく、低エネルギーでもすでに λ^D が相対的に短いためだという定性的推測もときおり見かけます (シッフは古典最近接距離を ρ として前節最後の条件を見積もっています)。もっと変化の激しいポテンシャルでも、高エネルギーでは λ^D が短く、古典近似が良くなると期待されます。でも、剛体球散乱は特殊です。その表面で $V(r)$ が一気に変わるので $\rho=0$ とも取れ、 λ^D はそれよりは短くなり得ません。

質量 m の高エネルギー粒子の剛体球による散乱で部分波 l の位相のずれ δ_l を計算するには、球ベッセル関数を使って表した正確な式で高エネルギー近似をするのが一般的ですが、^{4,9-11)} 実はもっと簡単に求められるのです。遠心力ポテンシャル $V_l(r)=l(l+1)\hbar^2/2mr^2$ は大きな r ($\gg l/k$) では運動エネルギー $E=k^2\hbar^2/2m$ に比べて小さいとして無視でき、自由運動の動径波動関数は s 波関数の位相がずれた漸近形

$$R_l^{\text{free}}(r) \propto \sin(kr - l\pi/2) \quad (4.9)$$

を取ります。^{9,12,13)} この位相のずれ $-l\pi/2$ は、漸近領域 $r \gg l/k$ に達するまでに V_l が徐々に及ぼした影響の結果です。

剛体球ポテンシャル (4.5) のもとでは $ka \gg l$ を満たす高エネルギーでなら $r \geq a$ では $r \gg l/k$ なので V_l は E に対して無視でき、 l 波動関数は s 波と同じく $\sin\{k(r-a)\}$ に比例します。これを自

由運動波動関数(4.9)と比べれば、位相が $\delta_l = -ka + l\pi/2$ だけずれていることが分かります。¹¹⁾

この δ_l を付録4Aの式(4A.2)に代入すれば σ^{sc} を近似計算できます。古典論では $b < a$ のときに散乱が起こりますが、量子論でこれに相当する $l < ka$ (付録4A)の範囲だけで式(4A.2)の部分波についての和を取ればよいでしょう。 $\sin^2 \delta_l$ は平均として $1/2$ なので(付録4Cの導出法に注意)

$$\sigma^{sc} \simeq \frac{2\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{ka} (2l+1) = \frac{2\pi}{k^2} (ka+1)^2 \simeq 2\pi a^2 \quad (4.10)$$

となります。もしも各部分波がフルに散乱されていれば、付録4Aに示す量子因子4のため σ^{sc} は古典論の4倍になるはずですが、各部分波は平均として半分しか散乱されず、 σ^{sc} は半減します。なお、 $l=ka$ まで和を取りながら、 $l \ll ka$ と仮定して求めた δ_l を使いましたが、これによる誤差は ka の逆べきにつき高次になることが示せます。¹⁴⁾

$\theta < (kb)^{-1}$ での古典散乱の破綻(第4.3節)に戻りましょう。 $b \ll a$ は散乱全体にほとんど影響しないので $b \simeq a$ 辺りに注目すると、古典近似は小角 $\theta < (ka)^{-1}$ 辺りで破れます。それ以外の θ では古典近似が良いはずで、ほぼ等方的散乱で、 σ^{sc} への寄与は $\sim \pi a^2$ になるでしょう。残りの $\sim \pi a^2$ は小角領域 $\theta < (ka)^{-1}$ だけで担われるはずで、高エネルギー散乱では鋭い前方ピークが見られると予想できます。

実際、高エネルギー散乱の微分断面積 $|f(\theta)|^2$ を計算してみると、積分すればほぼ πa^2 になる高さ $\sim k^2 a^4/4$ の鋭いピークが $\theta < \pi/(ka)$ に現れ、 $\theta > \pi/(ka)$ では古典値 $a^2/4$ の周りに波打つ部分(積分値 $\sim \pi a^2$)が横たわり、2成分が見事に識別されて見えます(図14)。^{4,11)}

前方ピークは古典論では説明不可能な現象で、波動光学の回折(diffraction)を連想させます。正に幾何光学の光線束のような古典ビームが断面積 πa^2 を生ずる一方、剛体球の端による縁回折で入射波が球の「影」に回り込み、前方散乱に寄与してさらに πa^2 を加えるという解釈です。この回折による散乱を「影散乱」と呼びます。^{4,9-11,14)}

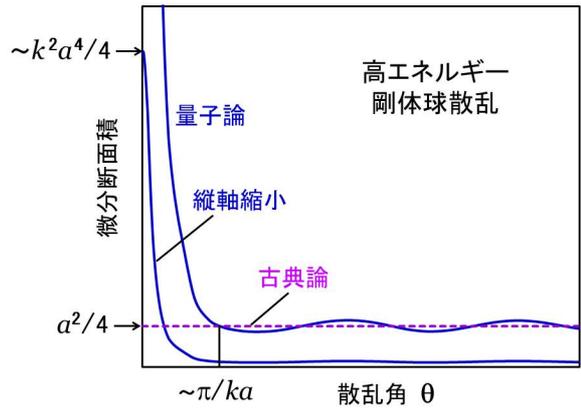


図14. 半径 a の剛体球による高エネルギー散乱角分布の概念図。 $\theta > \pi/ka$ では古典値をほぼ再現し、積分値 $\sim \pi a^2$ を生む。 $\theta < \pi/ka$ の影散乱ピークはエネルギーが増えるほど鋭さを増し、いずれ干渉項に打ち負かされて消えてしまっても積分断面積 σ^{sc} への寄与 $\sim \pi a^2$ は生き残る。(第5.3節で解説する計算に基づく概念図。)

$k \rightarrow \infty$ とともに古典近似が成り立つ角度範囲はますます小角まで伸び、影散乱ピークは鋭さを増し、高さは無限大に、角度幅はゼロに近づきますが、積分値は $\sim \pi a^2$ のまま残ります。注目すべきは、極端に高エネルギーで影散乱ピークの角度幅 $\simeq \theta^{\text{dif}} \equiv (ka)^{-1}$ がゼロに近づけば幅 $\Delta\theta \simeq \theta^{\text{int}} = (kr)^{-1/2}$ の干渉流束 j_r^{int} に飲み込まれ、影散乱ピークは有限距離 r での観測には現れなくなることです。それにも拘わらず「いわゆる」積分断面積 σ^{sc} には πa^2 の寄与が歴然と残っているのです。これも小角散乱の $|f(\theta)|^2$ が観測としての物理的意味を失うための見かけの矛盾です。

あまり高すぎず、そこそこに高エネルギーなら、干渉流束に消されない程度の幅の前方ピークが見られます。シッフは、影散乱ピークは無限に高いエネルギーでは消えてしまうと言う代わりに、「有限のエネルギーでなら観測できる」と表現しています。¹⁴⁾ その場合にも、ピークの中央($\theta \simeq 0$)に図13の干渉谷による穴が空くのは当然で、シッフもそれに注意を促しています(第5.4節)。

このピークは $(ka)^{-1} < (kr)^{-1/2}$ 、つまり $ka > r/a$ のとき干渉領域に入るので、極限 $k \rightarrow \infty$ や $r \rightarrow \infty$ を考えるならその順番に気を配り、有限値での様子をしっかりと認識しておく必要があります。

4.5 まとめ：前方はヤバい

距離 r で観測すると、 $\theta < \theta^{\text{int}} = (kr)^{-1/2}$ では無視できない入射波と散乱波の負の干渉効果により削られて入射流束は弱まっています。削られた流れは四方八方への散乱波となり、微分断面積 $|f(\theta)|^2$ を生じます。 $\theta > \theta^{\text{int}}$ では干渉が無視でき、この $|f(\theta)|^2$ は事実上測定できますが、 $\theta < \theta^{\text{int}}$ では干渉項を含む現実の流れの一部に過ぎず、独立の観測量としての意味を失います。それを忘れて $|f(\theta \rightarrow 0)|^2$ だけを議論しても、実際の物理現象を表せません。例えば、 $|f(\theta \rightarrow 0)|^2$ が発散して積分断面積が無限大になっても、現実には大きな球面を出入りする正味の流れは常にゼロです。

剛体球散乱で回折効果により $|f(\theta)|^2$ に現れる影散乱前方ピークは $E \rightarrow \infty$ でデルタ関数的になります。干渉項がこれを打ち消し、観測量からは消え去るにも拘わらず、影散乱断面積 πa^2 は残ったままで、全断面積 σ^{sc} を $2\pi a^2$ にします。

干渉は $|f(\theta)|^2$ の物理的役割をしばしば混乱させるにも拘わらず、狭い θ 範囲でしか起こらないので触れない入門書もよく見ます。しかし、 $\theta \simeq 0$ をきっちり除外して「まやかし」断面積を避けてある名著もかなりあり(第3.4節)¹⁵⁻¹⁸⁾ 見過ごさないようにしたいものです。

付録 4A 積分断面積の量子効果因子

衝突パラメータが b から $b+db$ までの極薄入射ビーム殻がビームに垂直な面に当たる半径 b 、幅 db の輪の面積 $2\pi b db$ にその b での散乱確率 $P(b)$ をかけ、 $0 \leq b < \infty$ に亘り積分すれば古典断面積

$$\sigma_{\text{cl}} = \int_0^\infty 2\pi b P(b) db \quad (4A.1)$$

を得ます。ビーム中の古典粒子の運動量 p を $\hbar k$ に、また散乱中心周りの角運動量の2乗 $L^2 = (pb)^2$ を $l(l+1)\hbar^2 \simeq (l+1/2)^2 \hbar^2$ に対応させると、 b は量子論の $(l+1/2)/k$ に相当し、積分 $\int d(kb)$ が量子論では整数 l についての和に、 $\int b db$ は $\sum_l (l+1/2)/k^2$ に対応し、量子論断面積 $\sigma^{\text{sc}} = (\pi/k^2) \sum_l (2l+1) P_l$

が予想されます。厳密な式^{9,12,13)}

$$\begin{aligned} \sigma^{\text{sc}} &= (\pi/k^2) \sum_l (2l+1) |S_l - 1|^2 \\ &= (4\pi/k^2) \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (4A.2) \end{aligned}$$

と比べると $P_l = |S_l - 1|^2 = 4 \sin^2 \delta_l \leq 4$ と、 P_l は古典確率 $P(b)$ の4倍の範囲を動きます。因子4は純粋な量子論効果と言え、これがあちこちで古典-量子対応に興味ある影響を与えます。

付録 4B 低エネルギー剛体球散乱

砂川によれば「 $l=0$ の部分波は、ポテンシャルの中心に向かって、球対称な振幅をもって集中してきて、これが半径 a の剛体球によって散乱されることになり、このとき散乱に寄与するのは球の断面積 πa^2 であるよりも、むしろ球の全表面積 $4\pi a^2$ である」そうです。¹⁰⁾ 球対称な内向き波 e^{-ikr} が全方向から来て全表面積を見るということでしょうか。でも、高いエネルギー E でもこれは s 波なら同じことで、それに p 波以上が加われば積分断面積は $4\pi a^2$ 以上になるはずですが、実際には E の増加とともに $4\pi a^2$ から減っていくので、つじつまが合いません。また、入射平面波は外向き球面波も含むのですから、どうも筆者には納得できません。教科書 [7] の「This may be attributed to diffraction by a sphere whose radius is small compared with the de Broglie wavelength」⁴⁾ (斜体は本筆者)もあいまいで、少なくとも $4\pi a^2$ の必然性は分かりません。

付録 4C 剛体球散乱：乱雑位相論の誤り

式 (4A.2) を使って剛体球断面積を計算する際、教科書 [7] では、⁴⁾ $\sin^2 \delta_l = \sin^2(-ka + l\pi/2)$ は位相が大きいので l の変化とともに $[0, 1]$ 間の値をランダムに取るから平均値 $1/2$ で置き換えてよいとしています。しかし、これは誤りです。 $\sin^2 \delta_l$ は $\sin^2 ka$, $\cos^2 ka$, $\sin^2 ka$, $\cos^2 ka$, \dots と規則的に並び、隣り同士の和が必ず1になるところがミソなのです。式 (4A.2) の和は

$$\sum (2l+1) P_l = \sum l P_l + \sum (l+1) P_l$$

$$= \sum_l l P_l + \sum_{l'} l' P_{l'-1} = \sum_l l (P_l + P_{l-1})$$

と計算され、 $P_l + P_{l-1}$ は隣同士の $\sin^2 \delta_l$ の和の4倍(=4)なので、各 $\sin^2 \delta_l$ を $1/2$ で置き換えても同じことになる、というのが正しい証明です。

第4章 文献・注

- 1) B. H. Bransden and C. J. Joachain [4], §12.5.
- 2) L. I. Schiff [5], §21.
- 3) 高柳和夫 [3], §2-5.
- 4) M. S. Child [7], §3.3.
- 5) N.F. Mott and H.S.W. Massey [6], Chap. III.
- 6) L. D. Landau and E. M. Lifshitz [8], §135.
- 7) M. S. Child [7], §2.4.
- 8) L. D. Landau and E. M. Lifshitz [8], §127.
- 9) B. H. Bransden and C. J. Joachain [4], §12.3.
- 10) 砂川重信 [2], §3.6.
- 11) N. F. Mott and H. S. W. Massey [6], §II.6.
位相のずれ $\delta_l = -ka - l\pi/2$ との記述は誤り.
- 12) 高柳和夫 [3], §2-3.
- 13) 砂川重信 [2], §3.2.
- 14) L. I. Schiff [5], §19.
- 15) 砂川重信 [2], §2.3.
- 16) B. H. Bransden and C. J. Joachain [4], §12.2.
- 17) L. I. Schiff [5], §18.
- 18) L. D. Landau and E. M. Lifshitz [8], §123.

5 禪問答：影散乱はこうして起こる

－ 完全吸収体は不完全吸収体

5.1 入射波と散乱波の干渉が生む散乱波

前章でゼロ度弾性散乱の特殊性につき考察しました。一般論の後に扱った2例の一つが半径 a の剛体球による散乱で、いわゆる積分断面積 σ^{sc} が高エネルギー E で古典断面積 πa^2 の2倍になること、余分な πa^2 が「影散乱」によることを述べました。現実の物理現象としては $E \rightarrow \infty$ で消えてしまう影散乱前方ピークが σ^{sc} には寄与 πa^2 のまま残ってしまう不合理も指摘しました。

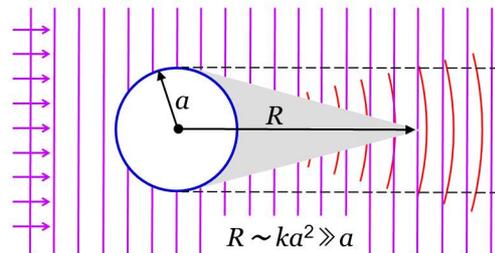


図15. 影散乱. でも、これって何? ⇒ 第5.4節.

「影散乱」は、剛体球の端による縁回折で入射波が球の「影」に回り込み、前方散乱に寄与する現象であると述べました。でも、なぜそう言えるのか、散乱理論に基づいた裏付けはしてありません。単なる波動光学の類推、憶測に過ぎないようなも思えます。影散乱の解説で図15のような絵をよく見かけます。入射平面波と前方散乱球面波、そして標的の背後に波が到達できないらしい影部分が描いてあります。図15には影が非常に長い旨が書き入れてありますが、短い影の絵もまま見受けられます。「影」とは単に球の後ろを意味するのでしょうか、それとも入射平面波 e^{ikz} が到達できない空疎な隙間が本当にあるのでしょうか？ 散乱断面積は散乱球面波だけで決まるのに、入射平面波が影に回り込んで散乱に寄与するとはどういうことでしょうか？ 散乱の量子論では縁回折効果を波動関数の言葉でどう理解できるのでしょうか？ 入射波の回折が $|f(\theta)|^2$ をどう変えられると言うのでしょうか？

教科書の説明の詳しさは千差万別です。入射波と散乱波の干渉で起こる回折性散乱によるもので、前方に鋭いピークを示すというのが、典型的な短い例です。¹⁾ 干渉により標的の背後にできた影によって余分に起こされる散乱という説明も多く見られます。キーワード「干渉」はほとんどの教科書で影散乱の解説に使われ、²⁻⁵⁾ 砂川の入門書は数少ないその例外の一つです。⁶⁾

しかし、散乱波の振幅 $f(\theta)$ だけで決まる断面積 $d\sigma^{sc}/d\omega = |f(\theta)|^2$ に起こる影散乱が、その散乱波と入射平面波との干渉により起こされたものだから、まるで禅問答です。影が散乱を起こす？世にも不思議な物語、怖〜いお話ですね！

教科書が解説する影散乱には2種類あります。多くの量子論や散乱理論の教科書が実数ポテンシャルの剛体球散乱について影散乱を論じています。¹⁻⁴⁾ 一方、大学演習量子力学、江沢執筆の散乱の章⁵⁾ や、砂川の入門書⁶⁾ には、虚数ポテンシャルで表される完全吸収球による影散乱が扱われています(第5.2節)。これは一時、原子核反応の分野でいろいろ議論された話題です。

5.2 影散乱：完全吸収体による弾性散乱

影散乱の本質は第3, 4章で論じた流束保存則、流れの保存則に密接に関わります。時間非依存実数ポテンシャル $V(\mathbf{r})$ のもとでは、 $V(\mathbf{r})$ が短距離型であろうがクーロン型であろうが、どの場所のどんな形、大きさの空間(微小空間から巨大空間まで)でも、そこに出入りする流れの総和は必ずゼロという一般則が積分形の保存則です。

球対称ポテンシャルのもとでは角運動量 l は保存するので、各部分波につき別々にこの流束保存則が成り立ちます。動径波動関数は漸近形

$$\begin{aligned} \phi_l(r) &\sim \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l) \\ &\propto e^{-i(kr - l\pi/2)} - S_l e^{+i(kr - l\pi/2)} \end{aligned} \quad (5.1)$$

をもち、大きな半径 r の球面から単位内向き波が入ると振幅 S_l の外向き波が出ていきます(第3.2節)。内向き波と外向き波の干渉はないので、物理的な流束保存則から直ちに $|S_l|^2 = 1$ と証明

されます。事実、 S 行列は実数の位相のずれ δ_l で $S_l = \exp(2i\delta_l)$ と書けます。

$V(r)$ が負の虚部を含めば一般に δ_l も複素数で、 $|S_l|^2 < 1$ となります(第3.6節)。これは散乱場が入射流束を一部吸収したことを意味しますが、本当の粒子消滅以外にも、入射チャンネルと違うチャンネルへ流束が失われる効果も表せます。これらを一括して「吸収」と呼びましょう。 $|S_{\text{abs},l}|^2 + |S_l|^2 = 1$ を満たす吸収 S 行列 $S_{\text{abs},l}$ を定義すると、吸収チャンネルへの流束を含む流束保存則が満たされます。実は、ポテンシャル散乱に限らず、一般の量子系につき流れの保存則は成り立ちます。

吸収断面積の部分波成分 $\sigma_{\text{abs},l}$ は⁶⁾

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{abs},l} &= (\pi/k^2)(2l+1)|S_{\text{abs},l}|^2 \\ &= (\pi/k^2)(2l+1)(1 - |S_l|^2) \end{aligned} \quad (5.2)$$

と表せます。一方、弾性散乱部分波断面積は^{7,8)}

$$\sigma_l = (\pi/k^2)(2l+1)|S_l - 1|^2 \quad (5.3)$$

と書けます(付録4A)。散乱がなければ内向き波と同じ振幅 $S_l = 1$ の外向き波が出るので、 $S_l - 1$ は散乱による外向き波の振幅の変化を表します。無散乱のとき吸収チャンネルには波がないので、式(5.2)の $S_{\text{abs},l}$ からは1を引きません。

ぶつかったものはみな吸収され、跳ね返されるものはないという「完全吸収体」を考えます。入った流束はすべて吸収チャンネルへ流れてしまい、弾性散乱チャンネルへの外向き流束 $|S_l|^2$ はゼロになります。このとき、式(5.2)、(5.3)から

$$\sigma_{\text{abs},l} = \sigma_l = (\pi/k^2)(2l+1) \quad (5.4)$$

が導けます。完全に吸収したつもりが、それと等しい量、弾性散乱チャンネルへ逃げています。完全吸収体は必ず散乱波を生むのです。本当の完全吸収体はあり得ないとも言えます。散乱がなければ出てきたはずの単位外向き波まで吸収してしまい、逆に、寝ていた弾性散乱を「起こして」しまったという、皮肉な結末です。これは第3.2節で流れの保存則を満たすには非弾性散乱は必ず弾性散乱を伴うと述べた、その極端な例です。

剛体球散乱を起こす最高部分波は最近接距離が a になる $l \simeq ka$ であると第4.4節、式(4.10)の上

で述べました。完全吸収球でも式(4.10)の導出法を使い、部分波断面積(5.4)(剛体球散乱の部分波断面積の1/2)を $l=ka$ まで加え合せると、古典断面積と同じ πa^2 の吸収(完全吸収球なのでこれは納得)と、これと同量の弾性散乱が起こり、高エネルギー全断面積は剛体球散乱と同じく $2\pi a^2$ になることが分かります。^{5,6)} この弾性散乱の角分布は剛体球散乱での影散乱と同じく、鋭い前方ピークになることが次節で示されます。完全吸収球でも剛体球でも古典断面積と同量の余分な弾性散乱を生じるのは、入射波が回折効果で球の背後に回り込んで起こす影散乱の仕業なのだそうです。¹⁻⁶⁾

5.3 干渉を考えない影散乱表式

ここでしばし入射波と散乱波との干渉なんか忘れて、球対称ポテンシャルによる散乱の散乱波だけに着目してみましょう。散乱行列 S_l とルジャンドル(Legendre)多項式 $P_l(\cos\theta)$ とを使って表した散乱振幅の一般式^{7,8)}

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(S_l-1)P_l(\cos\theta) \quad (5.5)$$

が高エネルギー剛体球散乱では影散乱振幅と古典散乱振幅に二分できることを本節で示します。

まず、 S_l に関わらない項、 $S_l=0$ と置いた

$$f^{\text{shd}}(\theta) \simeq -\frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{ka} (2l+1)P_l(\cos\theta) \quad (5.6)$$

を考えます。和の上限が ka なのは前節の議論と同じです。 $S_l=0$ ですから、式(5.6)は完全吸収体の弾性散乱振幅です。実際、この項が正に影散乱(shadow scattering)を表すことが以下で分かるので、それを先取りして f^{shd} と書きました。

ルジャンドル多項式は $\theta=0$ で $P_l(\cos\theta)=P_l(1)=1$ を満たすので、 $f^{\text{shd}}(\theta=0)$ では $l < ka$ ($\gg 1$)の多数の部分波が同位相で加え合され、式(4.10)の導出と同様の計算により、

$$f^{\text{shd}}(\theta=0) \simeq -\frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{ka} (2l+1) \simeq -ika^2/2 \quad (5.7)$$

と高エネルギーで k に比例して増えることが分か

ります。微分断面積には高さ $k^2 a^4/4$ (古典微分断面積の $k^2 a^2$ 倍)の鋭い小角ピークが生じます。式(5.7)の虚部 $ka^2/2$ は完全吸収球の全断面積 $2\pi a^2$ の $k/4\pi$ 倍で、当然のことではありますが、光学定理が確認できます(第3.5節)。

証明は省きますが、 $|f^{\text{shd}}(\theta)|$ の小角ピーク幅は k に反比例して狭まります。 $k \rightarrow \infty$ では式(5.6)は無和になり、 $f^{\text{shd}} \propto \delta(1-\cos\theta)$ とデルタ関数の形を取り、⁹⁾ 幅は無限に狭く、 $\theta \neq 0$ では消えてしまいます。正にこれが前章から論じている影散乱角分布の特徴を表しています。

高エネルギー剛体球散乱では各部分波の位相のずれは $\delta_l = -ka + l\pi/2$ と近似でき(第4.4節)、散乱振幅 $f(\theta)$ から影散乱の振幅を除いた残り、 $f^{\text{cl}}(\theta) \equiv f(\theta) - f^{\text{shd}}(\theta)$ は

$$\begin{aligned} f^{\text{cl}}(\theta) &= (2ik)^{-1} \sum (2l+1)S_l P_l(\cos\theta) \\ &= (2ik)^{-1} e^{-2ika} \sum_{l=0}^{ka} (-1)^l (2l+1) P_l(\cos\theta) \end{aligned} \quad (5.8)$$

と書けます。これは $f^{\text{shd}}(\theta)$ と違い、交互に逆位相の和で、小角で急増しません。

マッセイ(Massey)とモーア(Mohr)は数値計算により、¹⁰⁾ $|f^{\text{cl}}(\theta)|^2$ が古典微分断面積に似てほぼ等方的になり、積分断面積 $\sim \pi a^2$ を与えること、不確定性原理のため古典論が破綻する小角領域 $\theta < \theta^{\text{dif}} = (ka)^{-1}$ (第4.3, 4.4節)で(波の縁回折と思われる効果で) $|f^{\text{shd}}(\theta)|^2$ が鋭いピークを示し、その積分も $\sim \pi a^2$ となることから、影散乱の概念を指摘しました。^{3,4,10,11)} 小角領域では $|f^{\text{cl}}(\theta)|$ は $|f^{\text{shd}}(\theta)|$ よりはるかに小さく、また $f^{\text{cl}}(\theta)$ と $f^{\text{shd}}(\theta)$ の干渉項は大勢に影響しません。第4.4節の図14はこの結果に基づいて影散乱と古典的散乱を分かりやすく描いた概念図です。

式(5.5)から明らかのように、影散乱の振幅 $f^{\text{shd}}(\theta)$ はいつもの散乱振幅公式に2項中の1項としてすでに埋め込まれています。 S_l の如何に係わらず、常に存在するごく当り前の波動効果です。ただ、それが物理現象として顕わに見えるためには、 S_l がかかったもう1項の $f^{\text{cl}}(\theta)$ (もちろん一般には古典的振舞を見せませんが)から $f^{\text{shd}}(\theta)$ が明らかに分離して見える角分布を示す

必要があります。剛体球、完全吸収球はその極端な好例なのです。

このように、高エネルギー剛体球散乱の散乱振幅は古典的な $f^{cl}(\theta)$ と影散乱振幅 $f^{shd}(\theta)$ に分離でき、また、影散乱部分は完全吸収球による弾性散乱の振幅に一致します。本節の議論も、完全吸収球の議論を振り返っても、すべて散乱波自身だけの話で、入射波が関わる余地はありませんでした。それもそのはず、影散乱は $|f(\theta)|^2$ そのものに現れる現象にほかなりません。でも、考えてみれば、入射波と散乱波の干渉により入射流束から削り取られて放射状に射出される流れが散乱流なのですから、見方によっては、散乱現象自体、所詮は干渉効果の働きと言えるかも知れません。縁回折との関連ももやもやして、この干渉効果、もう少し詳しく考察する必要があります。

5.4 干渉、影、影散乱：その本当の意味

いわゆる積分断面積 σ^{sc} に含まれる影散乱断面積は πa^2 になるのに、現実の影散乱は $E \rightarrow \infty$ で消えてしまうと述べました(第4.4節)。干渉項を無視した形式的断面積 σ^{sc} には影散乱が残っても、物理的断面積は干渉のため $\theta < \theta^{int} = (kr)^{-1/2}$ で負の大きな値に落ち込み、影散乱ピーク幅 $\theta^{dif} = (ka)^{-1}$ が θ^{int} より狭ければピークはこの干渉穴に飲み込まれてしまうからです。流れの保存則により負の落ち込みは $\sim 2\pi a^2$ になるので、これが影散乱ピークに勝つことは明らかです。

影散乱が消える条件 $\theta^{dif} < \theta^{int}$ は $r < r_c \equiv ka^2$ と書き換えられます。実験室のように観測点 r が有限値なら、エネルギーが極端に高くなればいずれ影散乱は消え失せるのです。

シッフが1953年に広島で行った講演で、¹²⁾ 第3.4節や第4.2節で解説した物理的断面積と通常の断面積との違いや有限距離 r での干渉効果を考察し、また、物理的積分断面積がゼロであることから、吸収・非弾性散乱がある場合を含む拡張光学定理も導いています(第3.5節)。

さらに、負の干渉流束が入射流束を削って散乱

標的の背後に長〜い影を作り(図15)、それが影散乱を引き起こすのだと言います。^{11,12)} その意味は、入射平面波はもちろん全空間を占めていますが、標的の背後に影ができるように、平面波を打ち消すように、これと同じ絶対値で逆位相の波が生じ、それが散乱振幅に与える影響が影散乱なのだと言います。この影には縁回折効果で入射波が徐々に回り込み、標的 a を見込む角度 a/r が $\sim \theta^{dif}$ まで小さくなる $r \sim R = ka^2$ まで達すると影は埋め尽くされます(図15)。^{11,12)} 高エネルギーでは ka が大きいので $R \gg a$ で、影は非常に長くなります。「影散乱」が消える条件は $r < r_c = ka^2$ でしたから、「影」が消える距離 $r > R$ で初めて干渉穴より角度範囲が広い影散乱が観測されることが分かります。 $E \rightarrow \infty$ では影は無限に長く、影散乱の断面積は πa^2 でも、宇宙のはるか彼方からもそれを見ることができません。

文献5)の図には影の長さ ka^2 が書き入れてあるのですが、その説明が(少なくとも、私の手元にある、定価650円で若い頃求めた版には)見当りません。なお、影の長さ ka^2 は波動光学でフレネル(Fresnel)領域とフラウンホーファ(Fraunhofer)領域の境目を表します。

影が途切れる $r \sim R$ 辺りでは干渉領域の大きさ $a^{int} = r\theta^{int}$ は $\simeq (R/k)^{1/2} \simeq a$ と、標的と同じくらいのサイズになります。さらに、そのくらい小角での散乱波は入射波と同程度の振幅をもつことをシッフは示しました。¹²⁾ この二つから、干渉が作る影が古典断面積と同程度の影散乱を引き起こすという解釈が妥当だと分かるとシッフは言います。^{12,13)}

影のない $r > R$ では $\theta^{dif} > \theta^{int}$ ですから、影散乱ピークの中心には干渉効果による穴が掘られます。すでに述べた通り、この干渉穴は r の増加とともにサイズはますます小さく、しかし負でますます深くなります。この穴をシッフは影の名残り(shadow remnant)と呼んでいます。クーロン散乱でも極端な前方の流束をグリーンと落ち込ませ、発散を阻止するのがこの干渉穴です。

回折効果により影領域がだんだん埋められて

いく様子を図15は表します。また、散乱球面波のうち、入射波との干渉効果が大きい領域の部分だけを描くことにより干渉領域を示しました。影が途切れる距離 $R(\gg a)$ で干渉領域サイズ a^{int} が剛体球や完全吸収球の半径 a とほぼ同じになることも表してあります。ただ、 r が増えれば θ^{int} が減る有様までは表せてないのをお許しください。

シッフは影散乱文献を全く引用していませんが、^{12,13)} 文献11)はすでに影のシッフ的解釈で前節の $f^{\text{cl}}(\theta)$, $f^{\text{shd}}(\theta)$ の振幅、位相を波動光学に対応させて解析しています。量子論の不確定性原理に通じる波動光学での光線概念の不確定性をレーリー卿が指摘していたこと、不確定性原理による古典散乱理論の破綻領域、つまり影散乱領域を $\theta \leq (ka)^{-1}$ とすると $E \rightarrow \infty$ で影散乱が πa^2 ほど起こること、 $f^{\text{shd}}(\theta)$ が円孔によるフラウンホーファ回折に対応し、その振幅から回折パターンのフラウンホーファ公式が導けることなども書かれています。実はこれは音波の回折を論ずる音響学の論文なのですが、平面波が剛体球により散乱されて球面波を生む式の展開も、影散乱の物理的解釈も、量子論の散乱理論と同じだと述べてあります。平面波の流束、散乱波の流束のほか、干渉項が生じて流れの保存則を満たすことや、前方に出る干渉項を忘れるととんでもない矛盾が生ずるなど、散乱の量子論そのままのような記述があちこちにあります。

影散乱はこのように奥深いものです。回折と干渉を引き合いに抽象的な短い説明でお茶を濁すのがほとんどの教科書ですが、それでは誤解を生じかねません。やはり、多少の式を使った具体的、多面的な解説が望まれます。そして、積分断面積 πa^2 の議論だけでなく、古典論が破綻する小角散乱にピーク構造をもつ微分断面積や散乱振幅の詳細な考察なしには、その本質は理解できません。影散乱は通常の散乱振幅公式中の1項に過ぎないごくふつうの波動力学効果でありながら、特殊な条件下で顕著な物理的意味を帯びたものです。波動光学や音響学との深い関係には興味をそそられます。

5.5 流れの保存と干渉：終りに当り

散乱とは入射ビームの一部があちこちに弾き飛ばされる現象です。入射流束に加えてさらに散乱流束が生じるわけではありません。流れの保存則により、散乱が起これば必ずその分だけ前方への流束は入射量より減ります。この事情はポテンシャルが短距離型でも長距離型でも、クーロン型でも全く同じです。量子論では入射波の流れに散乱波の流れが加わるとともに、入射波と散乱波の干渉により前方への流れが入射量より減り、保存則が満たされます。

第3, 4, 5章と流れの保存にまつわる話題を論じました。この保存則を成立させる干渉効果が諸場面で重要な役割を果たすにも拘わらず、ふつう扱う断面積 σ^{sc} はこの干渉を無視して定義してあります。それでも多くの場合、重大な問題が起こらないため、本質を素通りしがちです。

でも、干渉効果は重要な光学定理を生み出し、(一見、干渉に無関係そうですが) 非弾性散乱に必ず弾性散乱を伴わせ、完全吸収体に散乱波を放出させ、散乱標的の背後に影領域を作り、角分布に影散乱前方ピークを生み、そのピークやクーロン散乱を含む一般の前方散乱に穴を開けたり、興味ある働きをします。それでも、干渉を無視した通常の微分断面積 $d\sigma^{\text{sc}}/d\omega$ が前方で急増しない限り、干渉穴は大勢に影響しません。しかし、クーロン散乱のようにこれが前方で無限大に発散する場合や、高エネルギー剛体球散乱のように鋭い前方ピークが現れる場合、それを埋め合わせて流れを保存させるために強い干渉効果が必要なことが分かります。

さて、 σ^{sc} , $d\sigma^{\text{sc}}/d\omega$ と書くのは面倒なので、今後は σ , $d\sigma/d\omega$ と書きますが、前方では現実の物理的断面積と違うことをくれぐれもお忘れなく。

第5章 文献・注

- 1) B. H. Bransden and C. J. Joachain [4], §12.3.
- 2) L. I. Schiff [5], §19.
- 3) M. S. Child [7], §3.3.

- 4) N. F. Mott and H. S. W. Massey [6], §II.6.
- 5) 小谷正雄, 梅沢博臣編 [11], 第8章 §21.
- 6) 砂川重信 [2], §3.5.
- 7) 砂川重信 [2], §3.2.
- 8) 高柳和夫 [3], §2-3.
- 9) $\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)P_l(\cos\theta) = 2\delta(1-\cos\theta)$, 高柳和夫 [3], §2-4, 式(94).
- 10) H. S. W. Massey and C. B. O. Mohr, Proc. R. Soc. Lond. A **141**, 434 (1933).
- 11) H. Wergeland, Avh. Norske. Videns.-Adad. Oslo, I. Mat.-Nat. Klasse, 1945, No.9.
- 12) L. I. Schiff, Prog. Theor. Phys. **11**, 288 (1954).
- 13) L. I. Schiff [5], §20.

6 散乱振幅の位相が断面積を変える — 似た者同士の衝突はややこしい

6.1 古典論で表せないクーロン散乱

まずクーロン散乱の例から話を始めましょう。素電荷 e の z 倍と Z 倍をもつ点電荷二つが相対運動エネルギー E で衝突するとき、クーロン散乱振幅 $f_C(\theta)$ (付録6A)により重心系微分断面積は

$$\frac{d\sigma_R(\theta)}{d\omega} = |f_C(\theta)|^2 = \left(\frac{C}{4E}\right)^2 \sin^{-4}\Theta \quad \left(\Theta = \frac{\theta}{2}\right) \quad (6.1)$$

と表せます。ここで $C = zZe^2$ で、相互作用ポテンシャルは $V(r) = C/r$ です。

式(6.1)は複素散乱振幅 $f_C(\theta)$ の位相因子 $e^{i\Phi}$ に依らず、位相(偏角)は誤りでも絶対値は正しいボルン(Born)近似 $f_C^B(\theta)$ (第8.2節)を使っても同じです。一般に、散乱振幅の位相なんて所詮、理論屋のお遊び、現実の物理現象を表す断面積にとり何の意味もないと思いませんか? ところがどうして、この位相がクーロン散乱の角分布を全く変えてしまうことがあるのです(第6.3節)。

式(6.1)は量子力学の確立以前、1910年代初頭にはすでに金属箔内の何らかの点電荷(実は原子核)によるアルファ線の散乱を説明するため、ラザフォードが古典力学により導き、弟子ガイガー(Geiger)とマースデン(Marsden)がさらに実験

的に確認し、ラザフォード公式として知られています。¹⁾ 歴史的業績ですが、ラザフォードには運も味方しました。それは、古典論でも量子論でも同じ角分布(6.1)が導ける特殊性のため、彼の解析に量子論の知識が不要だったことです。

実はもう一つ、物理学史上、恐らく語られない幸運がありました。もしも当時、アルファ粒子ビーム同士の交差実験ができたなら、その結果に彼は頭を抱えたことでしょう。金属原子核による散乱とは違い、アルファ-アルファ衝突の散乱角分布は式(6.1)に従わず、振動するはずだからです(第6.3節)。陽子ビーム同士の衝突でも同じです。そんな高度な実験技術がなくてラザフォードは幸運でした。アルファ粒子同士、陽子同士と言っても、各粒子の電荷分布や強い相互作用が関わるような高エネルギー衝突のことはありません。粒子を点電荷と見なせるような単純な原子衝突の世界を想定しています。

陽子(アルファ粒子)がもう一つの陽子(アルファ粒子)からかなり遠くを通り過ぎるのなら、あいつも荷電粒子か、と少しだけ脇へそれ、遠方衝突(小角散乱)は単純なラザフォード公式で表せます。しかし、近づいて相手も自分と同じ顔だと知ると複雑な思いが起き、ふつうの衝突では済みません。点電荷同士のぶつかり合いぐらい昔ながらの論法で解決できると思いきや、量子論にそそのかされ、ややこしい粒子関係? を反映して近接衝突(大角散乱)は異様になり、式(6.1)よりもっと面倒なモット(Mott)公式

$$\frac{d\sigma_M(\theta)}{d\omega} = \left(\frac{C}{4E}\right)^2 [\sin^{-4}\Theta + \cos^{-4}\Theta + 2\gamma \sin^{-2}\Theta \cos^{-2}\Theta \cos\{(C/E)k \log(\tan\Theta)\}] \quad (6.2)$$

に従うようになります(第6.3節)。²⁻⁵⁾ もちろん、相互作用は C/r だけとしての話です。アルファ粒子同士の衝突では γ は1, 陽子同士なら $-1/2$, また k は相対運動の波数です。遠方衝突なら θ が小さく、大括弧内で第1項だけが他よりはるかに大きく、モットはラザフォードに近づきます。

陽子-陽子衝突, アルファ-アルファ衝突は金属核による散乱と何が本質的に違うのでしょうか?

衝突相手が同じ顔ならどうだと言うのでしょうか？
 実は、そこにこそ、式(6.1)は再現できる古典論
 やボルン近似が説明できない量子論特有の物理
 が隠されているのです。そして、その物理が散乱
 振幅の位相を断面積に取り込むのです。

6.2 散乱振幅と断面積の関係を正す

束縛状態であれ散乱状態であれ、量子論では
 同種粒子は識別できません。同種荷電粒子間の
 純粹クーロン散乱に限らず、内部構造をもつ同
 種イオン同士、同種中性粒子同士の衝突 $A + A$
 でも、入射粒子と標的の識別不能性を考慮した
 同種粒子衝突論が必要になります。ただ、同じ原
 子同士でも量子状態が違えば区別でき、異種粒
 子と見なせます。衝突する異種粒子同士が同種
 構成粒子を含めば、また別の配慮をせねばなり
 ません(第6.5節)。

同種2粒子1,2を入れ換えても物理的本質は変
 わりません。空間座標の波動関数 $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ とス
 ピン波動関数 $\chi^S(1, 2)$ の積である全衝突波動関
 数 $\Psi(1, 2)$ は粒子1,2の入れ換えにより関数形を
 変えず、物理的本質を変えない定数係数 c がか
 かるだけです。再度1,2を入れ換えれば再び c が
 かかり、それで元の $\Psi(1, 2)$ に戻るはずですから
 $c^2 = 1$, したがって $c = \pm 1$ です。 $c = 1$, つまり
 2体の交換に対して $\Psi(1, 2)$ が不変な(対称な)粒
 子をボーズ粒子, $c = -1$, つまり負号が付く(反
 対称な)粒子をフェルミ粒子と呼びます。

ぶつかる同種2粒子の重心上で見れば両者が反
 対方向から対称に近づき、衝突後は反対方向に対
 称に離れて行きます。2粒子の交換は相対距離ベ
 クトル $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 = (x, y, z) = (r, \theta, \phi)$ を逆向きの
 $-\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1 = (-x, -y, -z) = (r, \pi - \theta, \phi + \pi)$ に変
 えるので、 $\chi^S(1, 2)$ の対称性に応じ、 $\psi(\mathbf{r})$ は反転
 $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ に対し対称か反対称かのどちらかです。
 ところが、ふつうの弾性衝突波動関数の漸近形

$$\varphi(\mathbf{r}) \sim e^{ikz} + f(\theta, \phi) e^{ikr}/r \quad (6.3)$$

は対称でも反対称でもありません。こんな漸近
 形では同種粒子間衝突など表せません。

同種粒子の交換はハミルトニアンを変えず、そ
 の固有関数 $\varphi(\mathbf{r})$ と交換後の $\varphi(-\mathbf{r})$ は共通のシュ
 レーディンガー方程式を満たすので(付録6B),

$$\begin{aligned} \psi_{\pm}(\mathbf{r}) &= \varphi(\mathbf{r}) \pm \varphi(-\mathbf{r}) \\ &\sim e^{ikz} \pm e^{-ikz} \\ &\quad + [f(\theta, \phi) \pm f(\pi - \theta, \phi + \pi)] e^{ikr}/r \quad (6.4) \end{aligned}$$

も同じく満たします。粒子の交換 $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ に対し
 $\psi_+(\mathbf{r})$ は対称, $\psi_-(\mathbf{r})$ は反対称で我々の望み通り
 です.^{2, 3, 5-8} 荷電粒子同士の衝突では付録6Aの
 修正を施せばこれと同様の ψ_{\pm} が得られます。

式(6.4)の意味は、重心系で z 軸正負方向から
 等しい振幅で同種粒子の二つの平面波が入射し
 (対称または反対称な定在波 $\cos kz$, $\sin kz$ と
 言えます), 互いに相互作用し合うと、散乱球面
 波が2成分の重ね合せの振幅をもって出て行くこ
 うことです。第1の振幅を直接項, 第2の振幅
 を反跳項と呼びましょう。それぞれの物理的な
 意味を図16に従い説明します。以下、球対称相
 互作用を考え、 ϕ 依存性がないものとしします。

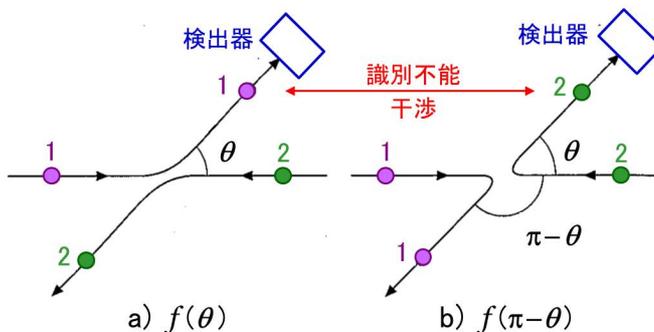


図16. 重心系での同種粒子衝突. a) 直接項. b) 反跳項. 古典同種粒子なら両方の微分断面積の和が検出器に捕えられる。原理的に区別できない量子論粒子なら両散乱振幅の干渉が起こる。

仮に、古典論のように入射粒子1と標的粒子2
 の運動を原理的に別々に追えるものとします。こ
 れを識別可能(distinguishable)と言います。す
 ると、直接項 $f(\theta)$ (図16a)は入射粒子の角度 θ
 の散乱を表し、その方向に置いた検出器に捕えら
 れます。反跳項 $f(\pi - \theta)$ (図16b)は入射粒子の角
 度 $\pi - \theta$ の散乱を表しますが、これは両粒子の重
 心系運動量ベクトルが逆向きなことから、跳ね

返された(反跳を受けた)標的粒子が先ほどと同じ検出器に入ることの意味です。つまり、ある方向に出てくる散乱粒子と反跳標的粒子を共通の検出器と一緒に捕えることになり、断面積

$$\frac{d\sigma_{\text{dis}}(\theta)}{d\omega} = |f(\theta)|^2 + |f(\pi-\theta)|^2 \quad (6.5)$$

が測定されるはずですが、

一方、式(6.4)によれば、原理的に両粒子を識別できない(indistinguishable)量子論では散乱振幅の段階で直接項と反跳項が重ね合されるので2項の間に干渉が起こり、微分断面積は

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_{\pm}(\theta)}{d\omega} &= |f(\theta) \pm f(\pi-\theta)|^2 \\ &= \frac{d\sigma_{\text{dis}}(\theta)}{d\omega} \pm \frac{d\sigma_{\text{ind}}(\theta)}{d\omega}, \end{aligned} \quad (6.6)$$

$$\frac{d\sigma_{\text{ind}}(\theta)}{d\omega} = f(\theta)f^*(\pi-\theta) + f^*(\theta)f(\pi-\theta) \quad (6.7)$$

と書けます。正にこの干渉断面積(6.7)が、異種粒子衝突と違い、本章の見出し通り散乱振幅 $f(\theta)$ の位相に依存するのです。干渉効果には位相の重要な役割がつきものです。

長距離力のため小角散乱の断面積が急に立ち上がるとき、そこでは $|f(\theta)| \gg |f(\pi-\theta)|$ ですから干渉項(6.7)は $|f(\theta)|^2$ に比べて小さいことが分かります。小角散乱を起こす遠方衝突では「原理的に」識別できようができませんが、どうせ遠く離れているので事実上、区別できるという物理効果の現れです。

式(6.5)~(6.7)には θ と $\pi-\theta$ が対等に入っています。 $\xi=\theta-\pi/2$ と置くと、これらすべての表式が $\theta=\pi/2+\xi$ と $\pi-\theta=\pi/2-\xi$ を対等を含む ξ の偶関数で、重心系微分断面積は $\theta=\pi/2$ の左右で対称です。ただ、これは識別不能性に依るわけではなく、衝突粒子同士が識別できるとした $d\sigma_{\text{dis}}(\theta)/d\omega$ も $\theta=\pi/2$ の左右で対称です。単に同一方向に出る同質量の散乱粒子と反跳粒子を検出器と一緒に捕まえているだけの効果です。

実験室系では同種粒子弾性散乱の散乱角 θ_L は重心系 θ の1/2です(第0.9節)。実験室系では $\pi/2$ 以上の後方散乱はありません。単位立体角当りの実験室系微分断面積 $d\sigma_L(\theta_L)/d\omega_L$ は重心

系微分断面積の $4\cos\theta_L$ 倍となり、⁹⁾ $\theta_L=\pi/4$ の左右に非対称ですが、単位散乱角 θ_L 当りの微分断面積 $d\sigma_L(\theta_L)/d\theta_L=2\pi\sin\theta_L[d\sigma_L(\theta_L)/d\omega_L]=4\pi\sin(2\theta_L)[d\sigma(\theta)/d\omega]$ なら対称です。

同種粒子衝突の境界条件(6.4)には入射波が二つあります。衝突の数え方も異種粒子衝突と違い散乱粒子と反跳粒子の両方を数えるので、衝突回数に対し積分断面積は通常の倍になります。したがって、積分断面積からレート定数を求め、衝突頻度を出す際には最後に半減せねばならず、また平均自由行程は2倍する必要があります。⁷⁾これを避けるため、積分断面積を $0\leq\theta\leq\pi/2$ だけの積分とする流儀もありますが、^{3,10,11)}本章では文献2,5,7)に従い、 $0\leq\theta\leq\pi$ を採用します。

6.3 スピン0同士, 1/2同士の衝突

干渉項 $d\sigma_{\text{ind}}(\theta)/d\omega$ が現実の断面積にどう効くのか、スピンの値ごとに考えます。話を単純にするため、相互作用は球対称でスピンに依らないものとします。

スピンをもたない同種ボーズ粒子、例えばヘリウム原子 ${}^4\text{He}(1s^2)$ 同士やアルファ粒子同士の弾性衝突は最も簡単です。スピン波動関数 $\chi^S(1,2)$ を考える必要がないのですから。ボーズ粒子なので2粒子の交換に対し、つまり、変換 $\mathbf{r}\rightarrow-\mathbf{r}$ に対し $\psi(\mathbf{r})$ は対称で、式(6.6)で+符号を採用すべきで、 $d\sigma/d\omega=d\sigma_+/d\omega$ です。

具体例としてスピン0の原子核同士のクーロン散乱を考えます。¹²⁾付録6Aのクーロン散乱振幅 $f_C(\theta)$ を式(6.6)に代入して+符号を採用すれば、 $\gamma=1$ とした式(6.2)が得られます。^{2,3,5)}式(6.2)のすぐ後では $\gamma=1$ の例としてアルファ粒子同士の衝突だけ挙げましたが、スピン0の同種点電荷同士の衝突一般に使えるのです。なお、式(6.2)の大括弧内第1項、第2項は「識別可能」微分断面積(6.5)の直接項、反跳項に相当し、第3項が式(6.7)の干渉項、「識別不能」項に相当します。

2粒子がスピン s をもてば、その合成スピン S の波動関数 $\chi^S(1,2)$ が問題になります。その最も簡単な場合として $s=1/2$ の粒子の2体系を扱い

ます。電子、陽電子、陽子、ヘリウム原子同位体 ${}^3\text{He}(1s^2)$ やその原子核がその例です。

ヘリウム原子の電子スピン状態を思い出しましょう。2電子とも上向きスピンの波動関数 $\chi^S(1,2)=\uparrow\uparrow$, 両方とも下向きスピンの $\downarrow\downarrow$, 逆向きスピンの $\uparrow\downarrow+\downarrow\uparrow$ は2電子の交換に対し対称な3重項 ($S=1$, オルソヘリウム) を成し, $\chi^S(1,2)=\uparrow\downarrow-\downarrow\uparrow$ は反対称な1重項 ($S=0$, パラヘリウム) を成します。他のどんな $s=1/2$ の粒子2個でも合成スピン状態は同じです。

$s=1/2$ はフェルミ粒子で, 互いの交換に対し $\psi(\mathbf{r})\chi^S(1,2)$ は反対称なので, $\chi^S(1,2)$ とは逆に, $\psi(\mathbf{r})$ は1重項では対称, 3重項では反対称です。1重項なら式(6.4)で ψ_+ , 式(6.6)で $d\sigma_+/d\omega$, 3重項なら ψ_- , $d\sigma_-/d\omega$ を採用すべきです。¹³⁾

完全にスピン偏極した(全粒子のスピンが同方向を向いた)気体中では3重項散乱しか起きず, $d\sigma/d\omega=d\sigma_-/d\omega$ です。スピン偏極が全くなければ1重項と3重項の実現確率(統計重率)はスピン多重度 $2S+1$ の比1:3なので, 重み付き平均は

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{\sigma}(\theta)}{d\omega} &= \frac{1}{4} \frac{d\sigma_+(\theta)}{d\omega} + \frac{3}{4} \frac{d\sigma_-(\theta)}{d\omega} \\ &= \frac{d\sigma_{\text{dis}}(\theta)}{d\omega} - \frac{1}{2} \frac{d\sigma_{\text{ind}}(\theta)}{d\omega} \end{aligned} \quad (6.8)$$

となります。第二の等号の右辺を式(6.6)から出すとき, 1重項と3重項の散乱振幅 $f(\theta)$ が等しいと仮定しました。これは一般には正しくありませんが, 本節冒頭の仮定のもとに成り立ちます。

式(6.8)は $s=0$ のときに比べ, 干渉項の係数に $-1/2$ がかかります。クーロン散乱なら $\gamma=-1/2$ としたモット断面積(6.2)になります。

$s=0$ の粒子対と $s=1/2$ の粒子対につき式(6.2)での識別不能効果 $\gamma d\sigma_{\text{ind}}(\theta)/d\omega$ と識別可能断面積 $d\sigma_{\text{dis}}(\theta)/d\omega$ の比を図17に示します。式(6.2)の $(C/E)k$ が干渉効果による顕著な振動の周期を決めますが, 図は ${}^{12}\text{C}$ 原子核 ($s=0$) 同士の5MeVでの衝突に相当する $(C/E)k$ を使っています。質量が ${}^{12}\text{C}$ の c 倍, 電荷 ze の粒子なら $E=5c(z/6)^4$ MeV で図の曲線になります。例えば, 電子なら $E=0.18\text{eV}$ で図の $s=1/2$ の曲線になります。

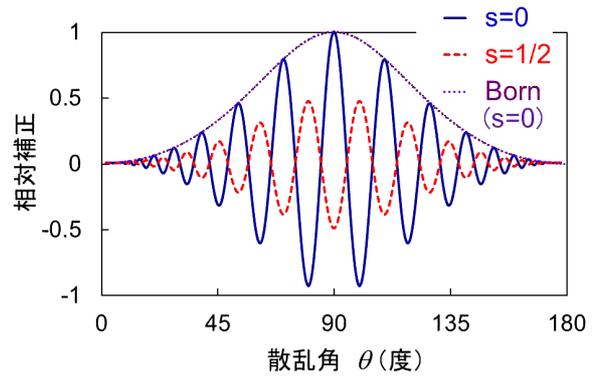


図17. クーロン散乱での同種粒子効果. モット断面積(6.2)中の識別可能断面積に対する相対的識別不能補正 $\gamma[d\sigma_{\text{ind}}(\theta)/d\omega]/[d\sigma_{\text{dis}}(\theta)/d\omega]$. 用いたパラメータは ${}^{12}\text{C}(s=0)$ 核同士の5MeVでの衝突に相当. $s=0$ につきこの効果をボルン近似のクーロン散乱振幅で計算したのもを示す。

正しいクーロン散乱振幅の代りにそのボルン近似(付録6A)を式(6.6)で使っても, 絶対値は正しいので $d\sigma_{\text{dis}}(\theta)/d\omega$ は再現されます。でも, 本来あるべき θ 依存の位相がなく, 式(6.2)の干渉項で $\cos\{(C/E)k \log(\tan \Theta)\}$ が1に変わり, 図17に見られるように, 振動のないのっぺらした角分布になってしまいます。これが第6.1節で触れたクーロン散乱振幅の位相の重要性です。

6.4 一般のスピン同種粒子衝突

一般のスピン s の場合でも, 完全偏極気体中の2体衝突ではスピン波動関数 $\chi^S(1,2)$ は必ず対称ですから, ボーズ気体なら $\psi(\mathbf{r})$ は対称で $d\sigma/d\omega=d\sigma_+/d\omega$, フェルミ気体なら $\psi(\mathbf{r})$ は反対称で $d\sigma/d\omega=d\sigma_-/d\omega$ です。

スピン偏極がないときは, $2s+1$ 個の合成スピン状態 $S=0,1,\dots,2s$ を対称状態と反対称状態に分け, それぞれの統計重率を使えば平均断面積

$$\frac{d\bar{\sigma}(\theta)}{d\omega} = \frac{s+1}{2s+1} \frac{d\sigma_{\pm}(\theta)}{d\omega} + \frac{s}{2s+1} \frac{d\sigma_{\mp}(\theta)}{d\omega} \quad (6.9)$$

を得ます。^{6,8)} 複号は上がボーズ粒子用で, 対称(反対称)な $\chi^S(1,2)$ に対称(反対称)な $\psi(\mathbf{r})$ を対応させたもの, 下がフェルミ粒子用でその逆に対応させたものです。式(6.6)を使い, $2s$ が偶数ならボーズ粒子, 奇数ならフェルミ粒子である

があります。^{17, 18)} また、電子-原子衝突では入射電子と原子内電子との識別不能性を衝突系全体の電子スピン状態に応じて適切に考慮しなければなりません。^{19, 20)}

付録 6A クーロン散乱振幅

クーロンポテンシャル $V(r) = C/r$ による散乱の散乱振幅 f_C とそのボルン近似 f_C^B (第 8.2 節) は

$$f_C(\theta) = f_C^B(\theta) \exp\{i\Phi(\theta)\}, \quad (6A.1)$$

$$f_C^B(\theta) = -(C/4E) \sin^{-2} \Theta, \quad (6A.2)$$

$$\Phi(\theta) = -k(C/E) \log(\sin \Theta) + \eta \quad (6A.3)$$

と書けます。²¹⁻²⁵⁾ ここで $\Theta = \theta/2$, k は波数, η は C/v (v は初期相対速度) により決まるある定数です。ただし、散乱振幅の意味がふつうの散乱とは少し違います。正しい波動関数の漸近形は

$$\exp\{ikz + ik(C/2E) \log(2kr \sin^2 \Theta)\} + f_C(\theta) \frac{\exp\{ikr - ik(C/2E) \log 2kr\}}{r} \quad (6A.4)$$

です。いかに大きな r でも式 (6.3) には決して近づきません。ふつうの散乱では漸近的には散乱振幅だけが相互作用の効果を表しますが、クーロン散乱では散乱波の動径関数や入射波までも相互作用の影響を受けます (第 0.6 節)。²⁶⁾

付録 6B 同種粒子を交換した波動方程式

$\varphi(\mathbf{r})$ がシュレーディンガー方程式

$$H(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}) = \mathcal{E}\varphi(\mathbf{r}) \quad (6B.1)$$

をすべての \mathbf{r} で満たすならば、 $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ とした

$$H(-\mathbf{r})\varphi(-\mathbf{r}) = \mathcal{E}\varphi(-\mathbf{r}) \quad (6B.2)$$

も成り立ちます。一方、同種粒子を交換してもハミルトニアンは不変で $H(-\mathbf{r}) = H(\mathbf{r})$ ですから、

$$H(\mathbf{r})\varphi(-\mathbf{r}) = \mathcal{E}\varphi(-\mathbf{r}) \quad (6B.3)$$

が導けます。これを式 (6B.1) と比べれば $\varphi(\mathbf{r})$ と $\varphi(-\mathbf{r})$ が共通のシュレーディンガー方程式を満たすことが分かります。したがって、この二つの波動関数のどんな線形結合もやはり同じシュレーディンガー方程式を満たします。

第 6 章 文献・注

- 1) 市川行和, しょうとつ, 第 3 巻第 1 号 (2006); 別冊「しょうとつ」シリーズ 原子衝突実験の歩み (2009). 式 (1) の括弧付き係数は 2 乗すべき.
- 2) B. H. Bransden and C. J. Joachain [4], §12.6.
- 3) 砂川重信 [2], §4.4.
- 4) 文献 3) のモット公式では電子の電荷も α 粒子の電荷も同じ文字 e で表しているので注意を要する.
- 5) N. F. Mott and H. S. W. Massey [6], §XI.4.
- 6) L. I. Schiff [5], §§40, 41.
- 7) 高柳和夫 [3], §2-6.
- 8) 小谷正雄, 梅沢博臣 [11], §8-16.
- 9) 式 (0.22) に $\theta_L = \theta/2$ を代入すれば得られる.
- 10) E. Braaten and H.-W. Hammer, Phys. Rep. **428**, 259 (2006).
- 11) 文献 3) では入射流束まで半分にしてあるが、一般にはそうしない。その理由は文献 5), 6), 8) に詳しい.
- 12) 荷電粒子同士の衝突では入射波は平面波ではなく、いわゆるクーロン波になる (付録 6A).
- 13) N. F. Mott and H. S. W. Massey [6], §XI.5.
- 14) N. F. Mott and H. S. W. Massey [6], §XI.6.
- 15) R. Feltgen et al., J. Chem. Phys. **76**, 2360 (1982).
- 16) この「共鳴」はいわゆる共鳴散乱 (第 9 章) の意味ではなく、始めと終りのチャンネルが等しい内部エネルギーをもつという意味.
- 17) N. F. Mott and H. S. W. Massey [6], §XV.2.
- 18) 高柳和夫 [12], §7.4.
- 19) N. F. Mott and H. S. W. Massey [6], §XV.1.
- 20) 高柳和夫 [12], §5.3.
- 21) B. H. Bransden and C. J. Joachain [4], §12.5.
- 22) L. I. Schiff [5], §21.
- 23) 高柳和夫 [3], §2-5.
- 24) N. F. Mott and H. S. W. Massey [6], §III.2.
- 25) 小谷正雄, 梅沢博臣 [11], §8-14.
- 26) 第 0.6 節でクーロンポテンシャルの強さを表すパラメータとして使った α とここでの C との関係は $C = (\hbar^2/2m)\alpha$.

7 量子論に速度はあるか？

一 動きの速さを表す演算子，って

7.1 速度は位置の時間微分，か？

我々は頻繁に速度を使って衝突を論じます。質量 m_P の粒子が速度 \mathbf{v}_L で質量 m_T の静止粒子にぶつかる時、重心の速度 \mathbf{v}_{cm} や衝突後の2粒子の速度 $\mathbf{v}'_L, \mathbf{v}'_T$ の間にどんな関係があるか、これらは重心系ではどうなるか(第0.9節, 図8), 重心系から実験室系への散乱角や微分断面積の変換に粒子速度がどう関わるか(同節, 図9)は衝突論の基礎です。¹⁻⁴⁾ 粒子速度はその他多くの場面でダイナミクスの理解に必須です。でもこれ、実は古典粒子を頭に描いてはいませんか？

霧箱実験で観測される粒子の鋭い飛跡、あれこそ正に明確な位置と速度を同時に持った古典粒子の運動の紛れもない証拠でしょう。

古典論なら時間の連続関数である位置座標 $\mathbf{r}(t)$ の時間微分が速度です。一方、量子論の物理量、観測値は演算子とその期待値で表されるのです。でも、「速度演算子」なんて、授業で習いました？

古典論から類推すれば、位置演算子の時間微分を速度演算子とすべきでしょう。時間微分の計算には連続関数 $\mathbf{r}(t)$ を明確に決める必要があります。ところが、量子論には不確定性原理があります。位置 \mathbf{r} を明確に決めれば運動量 \mathbf{p} は全く決まりません。運動エネルギー演算子は運動量演算子 $\hat{\mathbf{p}}$ と粒子質量 m で $\hat{\mathbf{p}}^2/2m$ と書けるので、運動エネルギー E は $p^2/2m = |\mathbf{p}|^2/2m$ です。 \mathbf{p} が決まらなければ E も決まりません。衝突論で速度を使おうとすれば、運動量 \mathbf{p} も衝突エネルギー E も指定できなくなります。逆に、 \mathbf{p} や E を指定すれば粒子の現在位置を点で示すこともできないし、速度も決まりません(第7.2節)。

さらに、量子論の粒子はその位置の測定により乱されて状態を変えます。微小時間後に再び位置を測っても、すでに状態が変わっているのですから、測定結果に基づいて無理に決めた位置の時間微分には意味がありません(第7.7節)。

衝突過程、散乱現象を速度の概念なしに理解

せよとは大きな制限です。速度に基づく考察のためには量子論を捨て、古典論に戻らねばならないのでしょうか。でも、世にある教科書、論文には速度を用いた衝突過程の量子論的議論がいくらかでもあります。衝突論を学び始めた頃、皆さん、これには悩んだのではないのでしょうか。

7.2 粒子性を表せる波動方程式

z 方向の自由運動を表す平面波 $\psi_k(z) = e^{ikz}$ は固有値 $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z) = (0, 0, \hbar k)$ をもつ運動量演算子 $\hat{\mathbf{p}}$ の固有関数です。勝手な向きに波数ベクトル $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ をもつ平面波 $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z}$ は固有値 $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ をもつ運動量固有関数です。これらは固有値

$$E = p^2/2m = \hbar^2 k^2/2m \quad (7.1)$$

をもつ運動エネルギー演算子 $\hat{T} = -(\hbar^2/2m)\nabla^2$ の固有関数でもあり、次の自由運動の時間非依存シュレーディンガー方程式を満たします：

$$\hat{T}\psi_k(z) = E\psi_k(z), \quad \hat{T}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (7.2)$$

平面波はあいまいさのない3次元運動量 \mathbf{p} を表すのですから、不確定性原理により、無限に広い位置空間内のどこにいるか全く決まりません。実際、確率密度に比例する $|e^{ikz}|^2$ や $|e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|^2$ は3次元空間内のどこでも等しく1です。どこにいるか決まらなければ、存在位置の時間微分としての速度はもちろん決まりません。

しかし、元々、量子論が生まれたのは、光や物質が波動性と粒子性を併せもつという実験事実を古典論では説明できなかったからです。ですから、量子論の波動方程式は古典的な粒子性をも表せるように工夫されており、何らかの意味で粒子の速度という概念を取り出せるはずです。

当時、新たに構築されるべき波動理論、量子力学はその何らかの極限が古典論でなければならないというボーアの提唱、「対応原理」がありました。古典論との関係が注目され、空間や時間の狭い領域に局在する波動関数のかたまり、いわゆる波束(wave packet)の運動を古典粒子の運動に対応させるべきだと考えられました。現実にこの対応が見られる簡単な例を第7.3節で、ま

た量子力学をニュートンの運動方程式に結び付けるより具体的な定理を第7.4節で示します。

波動関数のかたまりを数学的にフーリエ展開すれば、いろいろな運動量 \mathbf{p} や周波数 ν 、したがってエネルギー $E = h\nu$ をもつ波の重ね合せになることが分かります。そこで、波束を表せるようにするため、量子論の波動方程式はこの重ね合せ、数学的には線形結合(1次結合)を許すように構築すべきだと考えられました。⁵⁾ 自由運動の時間依存シュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{T} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (7.3)$$

は正にそのように設計されています。つまり、 \mathbf{p} も ν も E も含まない線形方程式なので、異なる \mathbf{p} 、 ν 、 E の運動を表すいくつかの波動関数がこの方程式を満たせば、それらのどんな1次結合も、したがって1次結合で表されるどんな波束も同じ方程式を満たします。ポテンシャルエネルギー演算子 \hat{V} を加えたハミルトニアン \hat{H} についての一般のシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t) = (\hat{T} + \hat{V}) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (7.4)$$

も同じく波動関数の重ね合せを許します。

重ね合せで広がり $\Delta \mathbf{r}$ の波束を作れば空間内の位置 \mathbf{r} を各時点でそこそこの精度 $\Delta \mathbf{r}$ で決められ、速度もそこそこの精度で決まるでしょう。このとき、運動量 \mathbf{p} を精確に指定することは諦めざるを得ません。不確定性原理 $\Delta z \Delta p_z > \hbar$ (および x, y 成分の式) で許されるそこそこの精度 $\Delta \mathbf{p}$ ではなく \mathbf{p} が決まらないからです。その程度の範囲に亘って分布した運動量成分を重ね合せて初めて $\Delta \mathbf{r}$ 程度の波束が作れるのです。

$$\Delta z \Delta k_z \sim \Delta z \Delta p_z / \hbar \sim 1, \quad (7.5)$$

および同様な x, y 成分の式を満たす範囲 $\Delta \mathbf{k}$ に亘る波数ベクトル \mathbf{k} の平面波を重ね合せるとやっと $\Delta \mathbf{r}$ ほどに絞った波束が作れるのです。

波束の時間変化を調べるため、時間非依存方程式(7.2)を満たす平面波 $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ に時間依存因子 $\alpha_E(t) = e^{-iEt/\hbar}$ をかけてみます：

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \alpha_E(t) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - Et/\hbar)}. \quad (7.6)$$

変数 t, \mathbf{r} が分離された形式のこの時間依存平面波が自由運動の時間依存シュレーディンガー方程式(7.3)を満たすことは、第3.3節、式(3.12)の下の一般論から直ちに分かります。

時間依存平面波(7.6)に適当な係数 $c(\mathbf{k})$ をかけて \mathbf{k} の狭い範囲 $\Delta \mathbf{k}$ に亘り重ね合せ、

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \int_{\Delta \mathbf{k}} c(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - Et/\hbar)} d\mathbf{k} \quad (7.7)$$

とすればある広がり $\Delta \mathbf{r}$ の波束が作れます。⁶⁻⁸⁾

7.3 波束が動く群速度

簡単な波束モデルを試みます。わずかに異なる波数 $k = k_{\pm} = k \pm \Delta k$ 、したがってエネルギー $E_{\pm} = E \pm \Delta E = \hbar^2 k_{\pm}^2 / 2m$ をもつ二つの1次元平面波 $\Psi_k(z, t) = e^{i(kz - Et/\hbar)}$ の重ね合せ $\Phi(z, t)$ を作り、その虚部(実部でも結論は同じです)に公式 $\sin 2x + \sin 2y = 2 \cos(x - y) \sin(x + y)$ を使うと

$$\begin{aligned} & \text{Im} \Phi(z, t) \\ &= \text{Im} [e^{i(k_+ z - E_+ t/\hbar)} + e^{i(k_- z - E_- t/\hbar)}] \\ &= \sin(k_+ z - E_+ t/\hbar) + \sin(k_- z - E_- t/\hbar) \\ &= F(z, t) \sin(kz - Et/\hbar), \end{aligned} \quad (7.8)$$

$$F(z, t) = 2 \cos\{(\Delta k)z - (\Delta E)t/\hbar\} \quad (7.9)$$

を得ます。 z, t の変化とともに振動する式(7.8)の \sin 関数にかかる振幅 $F(z, t)$ は、小さい Δk を選べば ΔE も小さいのでゆっくり変動します。その有様を z の関数として図18に示します。

図の一つ一つのかたまりを波束と見なせます。かたまりが一つだけでなく無数にあるのは、たった二つの平面波の重ね合せという単純なモデルの限界ですが、物理の本質は表しています。一つの波束の広がり Δz は、式(7.9)で z が Δz ほど増えると振幅 $F(z, t)$ の \cos 関数の位相が π ラジアン増えて $|F(z, t)|$ のある最小点から次の最小点まで進むという条件により $\Delta k \Delta z \sim \pi$ を満たします。これは不確定性原理(7.5)を表します。

各波束の頂点では振幅(7.9)の \cos 関数の位相が π の整数倍になり、例えば位相ゼロの頂点は

$$z = \frac{\Delta E}{\hbar \Delta k} t \simeq \frac{dE}{d(\hbar k)} t = \frac{\hbar k}{m} t = \frac{p}{m} t \quad (7.10)$$

と動きます。式(7.9)により、すべての波束が崩れずに等距離で全体として進んでいきます。

式(7.10)はこれらの波束が一定の群速度

$$v_g = \hbar k/m = p/m \quad (7.11)$$

で z 軸正方向に進むことを表します。正に古典論の自由運動そのものです。一方、時間依存平面波 $\Psi_k(z, t)$ の位相のゼロ点は $z = Et/(\hbar k) = (\hbar k/2m)t$ と動きますから、位相速度は群速度の半分になります。

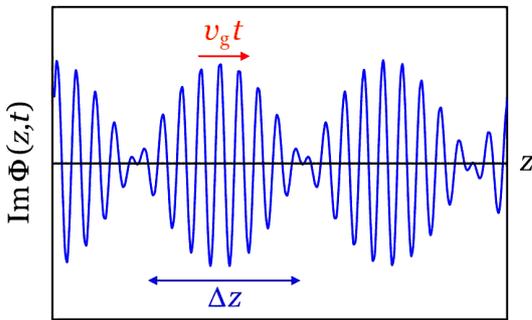


図18. 式(7.8)の波束モデル $F(z, t) \sin(kz - Et/\hbar)$. $\Delta z \Delta p \sim \pi \hbar$ を満たす空間広がり Δz の各波束が速度 $v_g = p/m = \hbar k/m$ で z 軸の正方向に進む。

あいまいさ $\Delta p = \hbar \Delta k$ をもつ運動量 $p = \hbar k$ の時間非依存平面波を時間依存描像に焼き直せば、大きさ Δz のかたまりが一定速度 p/m で動くことを表すというわけで、古典論に似て、運動量の本質は速度だと言えます。ただ、これは位置と不確定性関係にある量子論的速度で、位置を明確にすればするほど不明確になる速度なのです。

もっと一般の波束(7.7)を使っても同じ結論が導けます。散乱波動関数の漸近形を頭に置き、大きな r を考えます。式(7.7)の被積分関数は漸近領域では k の変化とともに激しく振動し、積分するとほとんどゼロになります。例外は位相が k の関数として停留値を取る辺りで、そこでは $d(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - Et/\hbar)/dk \simeq 0$ です。 z 軸を波数ベクトル \mathbf{k} の向きに選んでやれば $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = kz$ なので、この停留条件から式(7.10)が導かれます。⁹⁾ すなわち、式(7.7)で表される波束は、少なくとも大きな r では群速度(7.11)で等速直線運動をします。

7.4 量子論から導くニュートン方程式

相互作用下の時間依存波動方程式(7.4)を満たす $\Psi(\mathbf{r}, t)$ が波束を表すなら規格化でき、位置の期待値 $\bar{\mathbf{r}} = \langle \hat{\mathbf{r}} \rangle = \int \Psi^* \mathbf{r} \Psi d\mathbf{r}$ も運動量の期待値 $\bar{\mathbf{p}} = \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle$ も決まり、その間には古典論に似た関係

$$d\bar{\mathbf{r}}/dt = \bar{\mathbf{p}}/m \quad (7.12)$$

が成り立ちます。¹⁰⁻¹²⁾ まず、この式の z 成分

$$\frac{d\bar{z}}{dt} = \frac{\bar{p}_z}{m} = \frac{1}{m} \int \Psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \right) \Psi d\mathbf{r} \quad (7.13)$$

を証明します。波動方程式(7.4)を使い、時間微分をハミルトニアン \hat{H} で書き直せば

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{z}}{dt} &= \frac{d}{dt} \int \Psi^* z \Psi d\mathbf{r} \\ &= \int \left[\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} z \Psi + \Psi^* z \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right] d\mathbf{r} \\ &= \frac{i}{\hbar} \int [(\hat{H} \Psi)^* z \Psi - \Psi^* z \hat{H} \Psi] d\mathbf{r} \\ &= \frac{i}{\hbar} \int \Psi^* [\hat{H} z - z \hat{H}] \Psi d\mathbf{r} \end{aligned} \quad (7.14)$$

を得ます。最後の行は \hat{H} のエルミート性を使って導きました(第2.2節)。さらに、 $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$ の \hat{V} の部分が打ち消し合うことと微分関係式

$$\begin{aligned} \nabla^2(z\Psi) &= (\nabla^2 z)\Psi + 2(\nabla z) \cdot (\nabla \Psi) + z\nabla^2 \Psi \\ &= 2\frac{\partial}{\partial z} \Psi + z\nabla^2 \Psi \end{aligned} \quad (7.15)$$

を使うと、

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} [\hat{H} z - z \hat{H}] &= \frac{i}{\hbar} [\hat{T} z - z \hat{T}] \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} [\nabla^2 z - z \nabla^2] = -\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial z} = \frac{\hat{p}_z}{m} \end{aligned} \quad (7.16)$$

となり、これを式(7.14)に代入すれば式(7.13)が証明されます。 x 成分、 y 成分の式も同様に導けます。

さらに、証明は省きますが、

$$m \frac{d^2 \bar{\mathbf{r}}}{dt^2} = \frac{d\bar{\mathbf{p}}}{dt} = -\langle \nabla \hat{V} \rangle = \langle \hat{F} \rangle \quad (7.17)$$

も示せます。¹⁰⁻¹²⁾ $\hat{F} = -\nabla \hat{V}$ は力の演算子です。波束が鋭く、その範囲内でポテンシャル勾配 $\hat{F}(\mathbf{r})$ がほぼ一定なら $\mathbf{r} = \bar{\mathbf{r}}$ での値で代表でき、

$$m \frac{d^2 \bar{\mathbf{r}}}{dt^2} = -\nabla V(\bar{\mathbf{r}}) = F(\bar{\mathbf{r}}). \quad (7.18)$$

これは、鋭い波束の運動はニュートン(Newton)の運動方程式に従うという対応原理を表します。

$\hat{F}(\mathbf{r})$ の僅かな \mathbf{r} 依存性を扱うには $\boldsymbol{\rho} = \mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}$ のべき級数に展開すればよく、その初項が式 (7.18) です。次の項は $\boldsymbol{\rho}$ に比例しますが、その期待値は $\langle \boldsymbol{\rho} \rangle = \langle \mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}} \rangle = \bar{\mathbf{r}} - \bar{\mathbf{r}} = 0$ と消えます。ニュートン方程式 (7.18) の誤差の期待値は $\mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}$ について 2 次の微小量で、非常に小さいのです。¹²⁾

式 (7.12) と (7.17) または (7.18) を「エーレンフェスト (Ehrenfest) の定理」と呼びます。¹⁰⁻¹²⁾ 量子論の鋭い波束は同じ相互作用を受ける古典粒子とほとんど同じ運動をすることを証明する重要な定理です。第 7.1 節で触れた霧箱の飛跡もこれで納得がいきます。高エネルギー粒子を表す波束は鋭いことがミソです。

7.5 ぼやけていく波束

自由運動の線形波動方程式 (7.3) を満たす、波数がわずかに異なる解二つを重ね合わせて得られた図 18 の無限個の波束群は、時間が経過しても形を変えずに全体として z 方向に動き続けます。しかし、幅 $\Delta p/m$ に亘る多くの異なる速度成分を含むもっとそれらしい単一ピークの波束では、各成分がばらばらに動いて広がってしまわないでしょうか。少し具体例を調べてみます。

標準偏差 σ を $\Delta z, \Delta p_z$ として採用しましょう:

$$\begin{aligned} (\Delta z)^2 &= \sigma^2(z) = \langle (\hat{z} - \bar{z})^2 \rangle, \\ (\Delta p_z)^2 &= \sigma^2(p_z) = \langle (\hat{p}_z - \bar{p}_z)^2 \rangle. \end{aligned} \quad (7.19)$$

すると、必ず不等式 $\Delta z \Delta p_z \geq \hbar/2$ が成り立つことが数学的に証明できます (第 7.8 節)。¹³⁻¹⁵⁾

$z = z_0$ に中心をもつガウス型振幅の平面波

$$\Psi(z, t=0) = C \exp\left[-\frac{(z - z_0)^2}{4\zeta^2}\right] e^{ikz} \quad (7.20)$$

を時刻 $t=0$ で用意してみます。これは何の変哲もなさそうに見えて、実は積 $\Delta z \Delta p_z$ が最小値 $\hbar/2$ になる特別な波束で、^{8,13,15,16)} 最小波束と呼ばれます。¹³⁾ 規格化定数は $C = (2\pi\zeta^2)^{-1/4}$ です。式 (7.20) による期待値、標準偏差は次のようになります (添え字 0 は $t=0$ での値という意味です):

$$\begin{aligned} \langle \hat{z} \rangle_0 &= z_0, & (\Delta z)_0 &= \zeta, \\ \langle \hat{p}_z \rangle_0 &= k\hbar = p_z, & (\Delta p_z)_0 &= \hbar/2\zeta. \end{aligned} \quad (7.21)$$

初期条件 (7.20) で $z_0 = 0$ と選び、そこから自由運動の時間依存波動方程式 (7.3) により時間発展させてみると、時刻 t での確率密度分布は

$$|\Psi(z, t)|^2 \propto \exp\left[\frac{-(z - p_z t/m)^2/2}{\{(\Delta z)_0\}^2 + \{(\Delta p_z)_0 t/m\}^2}\right] \quad (7.22)$$

となります。^{13,16)} これを性質 (7.21) をもつ初期波束 (7.20) の形と比べると次のことが分かります:

1) 波束のピーク位置、したがって期待値 \bar{z} は一定速度 $p_z/m = \hbar k/m$ で正方向に動きます。これは群速度 (7.11) と同じです (図 19)。

2) 始め $(\Delta z)_0$ であった波束の幅が正負どちらに時間が経っても広がります。 $(\Delta z)_0$ が小さければほぼ一定速度 $(\Delta p_z)_0/m$ で広がります (図 19)。

自由運動でも波束は徐々にぼやけて粒子性を失い、位置の期待値は等速直線運動をしても期待値の実質的意味が薄れていきます。¹⁷⁾

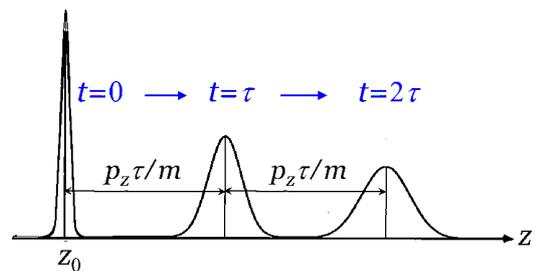


図 19. 初期波束 (7.20) の自由運動による時間発展 (7.22). ピーク位置は速度 $p_z/m = \hbar k/m$ で等速直線運動をし、幅の増加率は $\sim (\Delta p_z)_0/m$.

7.6 時間非依存衝突論での速度

時間非依存ハミルトニアン \hat{H} で定義される時間非依存波動方程式 $\hat{H}\psi = E\psi$ を波動関数 $\psi(\mathbf{r})$ が満たせば、式 (3.12) の時間依存波動関数 $\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar}$ が時間依存波動方程式 (7.4) を満たすことを第 3.3 節で証明しました。

その事実と、波束の運動量広がり $\Delta \mathbf{p}$ が非常に小さな時間依存波動関数はほとんど単一の \mathbf{p}, E をもつと言えることから、その波動関数が表す時間依存衝突問題は時間非依存波動関数 $\psi(\mathbf{r})$ を求める問題に帰着できることが分かります。 $\Delta \mathbf{p}$ が小さければ、波束は空間的には非常にぼやけています。しかし、いかにぼやけようとも、期

待値 $\bar{\mathbf{r}}$, $\bar{\mathbf{p}}$ さえははっきり決まればエーレンフェストの定理(7.12)により $\bar{\mathbf{p}}/m$ が速度を意味します。時間非依存問題は極限 $\Delta\mathbf{p} \rightarrow 0$ の話ですから、この速度は $\bar{\mathbf{p}}/m \rightarrow \mathbf{p}/m$ と理解できます。

速度のこの物理的考察に基づき、時間非依存衝突論で $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$ と書き、これを「速度」と呼びましょう。すると、この「速度」は古典論の速度と同じ諸関係式、実験室系と重心系での運動エネルギー、運動量ベクトル、散乱角、微分断面積の関係式を満たし、例えば、古典論・量子論共通の図8, 9が導けます。それは、これらの関係式が、量子論でも古典論と同じ形で成り立つ運動量保存則、エネルギー保存則(付録7A)と座標系の変換式から導かれるからです。

この「速度」の本質は運動量であり、位置座標と不確定性関係にあること、この「速度」を精度良く指定すれば位置はほとんど決まらないことさえ肝に銘じれば、古典論の速度が満たす式をそのまま使えます。入射粒子や散乱粒子は散乱中心から巨視的な距離離れた遠方で測定され、その位置は微視的にはごくあいまいに知るだけでよく、運動量を十分な精度で指定できます。以上の考察を踏まえて初めて速度を使った時間非依存量子論を安心して展開できるのです。

ちなみに、座標変換は単なる変数変換で、観測値の変換ではないので、位置が決まらなくても付録7Bの座標変換に何ら問題はありません。

結論として、不確定性原理の制限内で位置 \mathbf{r} も運動量 \mathbf{p} もある精度で決めつつ波束の時間発展を追えば、速度概念を表す $d\bar{\mathbf{r}}/dt$ は式(7.12)により $\bar{\mathbf{p}}/m$ に等しく、その $\Delta\mathbf{p} \rightarrow 0$, $\Delta\mathbf{r} \rightarrow \infty$ への極限として時間非依存量子論で \mathbf{p}/m を \mathbf{v} と書けば、古典的速度が満たす諸式をその \mathbf{v} も満たします。むしろ、単に古典関係式を再現するというだけでは量子論の実体が動く速さを意味しません。定理(7.12)により初めてこの「速度」の意味が分かるのです。 $\bar{\mathbf{p}}/m$ を速度演算子 $\hat{\mathbf{v}}$ と解釈すれば物理的に妥当な理論を構成できます。

これでこの章の本論は終わりますが、以上の議論に関わる話題を次の2節で取り上げます。

7.7 演算子の時間微分はくせ者

ランダウ-リフシッツは「速度演算子 $d\hat{\mathbf{r}}/dt$ 」が

$$d\hat{\mathbf{r}}/dt = \hat{\mathbf{p}}/m \quad (7.23)$$

を満たすと言います。¹⁸⁾ 彼らはまず

$$d\hat{\Omega}/dt = (i/\hbar)[\hat{H}\hat{\Omega} - \hat{\Omega}\hat{H}] \quad (7.24)$$

が時間 t を含まない演算子 $\hat{\Omega}$ に対して成り立つと言います。¹⁹⁾ (実は時間を含む一般の演算子を論じているのですが、ここでは t を含まない場合に話を限ります)。この $\hat{\Omega}$ を $\hat{\varepsilon}$ とし、式(7.16)を使えば式(7.24)の右辺は \hat{p}_z/m に等しく、 \hat{x} , \hat{y} についても同様に式(7.23)が出ると言います。¹⁸⁾

でも、式(7.23), (7.24)はなんか変ですよ。ランダウ-リフシッツだからとやみ雲に受け売りしないことです。 $\hat{\Omega}$ が t を含まなければ $d\hat{\Omega}/dt$ はゼロでしょ？ それに、一般に、物理量の測定により物理系は乱されて量子状態を変えてしまうんでしょ？ 同じ物理系の同じ物理量を微小時間後に再び測っても、最初の測定による乱れがあれば、測定値の時間変化など何の意味もないのでは？

例えば、ある時刻 t にある系の位置 $\mathbf{r}(t)$ を正確に測れば、不確定性関係により「速度」 \mathbf{p}/m は完全に不確定になり、微小時間 δt 後の位置 $\mathbf{r}(t) + (\mathbf{p}/m)\delta t$ は全く決まりません。¹⁸⁾

ただ、同等で独立な物理系を多数使えば、時間に依存する平均値 $\langle \hat{\Omega} \rangle$ やその時間微分を決めることができます。ランダウ-リフシッツは、古典論と同じような物理量の時間微分を量子論に持ち込むことはできないと述べて議論を始めます。¹⁹⁾ そして、量子論では、ある演算子 \hat{A} の期待値が $\hat{\Omega}$ の期待値の時間微分に等しければこの \hat{A} を $d\hat{\Omega}/dt$ と呼ぶぞ、つまり

$$\langle d\hat{\Omega}/dt \rangle = d\langle \hat{\Omega} \rangle/dt \quad (7.25)$$

が時間微分演算子 $d\hat{\Omega}/dt$ の定義だぞと宣言してしまいます。¹⁹⁾ あくまでも期待値を通じた便宜的な言葉遣い、約束です。 $\hat{\Omega}$ が t を含まなくても、波動関数が時間に依れば期待値も時間依存で、この $d\hat{\Omega}/dt$ なら一般にゼロではありません。この定義では、まるで純粋な演算子関係式かのように見える式(7.23)の本当の意味は、期待値の関係を表す

エーレンフェスト定理(7.12)そのものなのです。式(7.24)も期待値間の関係式を簡便記法で表したに過ぎません。教科書の上っ面だけを安易に拾い読みすると、とんでもない誤解に陥ります。

以下で説明する $\hat{\Omega}_H$ が満たすハイゼンベルグ(Heisenberg)の運動方程式

$$d\hat{\Omega}_H/dt = (i/\hbar)[\hat{H}\hat{\Omega}_H - \hat{\Omega}_H\hat{H}] \quad (7.26)$$

は式(7.24)と瓜二つです。^{20,21)}これは解析力学の運動方程式に似ており、量子力学と古典力学の対応の解析に役立ち、演算子の交換関係の物理的意味や不確定性原理の議論等々に発展する重要な式です。ただし、これを最初に書いたのはハイゼンベルグではないそうです。²²⁾(ニュートン力学も実は50年後のオイラーに帰するとか!)

以下、多少上級編ですが、考え方の概略だけ解説します。^{20,21)} \hat{H} は時間非依存とし、時間依存波動方程式(7.4)を満たす $\Psi(\mathbf{r}, t)$ を時刻0から t まで発展させる演算子を \hat{U}_+ 、 t から0に戻す演算子を \hat{U}_- とします。つまり、変数 \mathbf{r} を省略すると

$$\Psi(t) = \hat{U}_+ \Psi(0), \quad \Psi(0) = \hat{U}_- \Psi(t) \quad (7.27)$$

です。すると、どんな $\Psi(t)$ 、 $\Phi(t)$ に対しても

$$\int \Psi^*(t) \hat{\Omega} \Phi(t) d\mathbf{r} = \int \Psi^*(0) \hat{\Omega}_H(t) \Phi(0) d\mathbf{r}, \quad (7.28)$$

$$\hat{\Omega}_H(t) = \hat{U}_- \hat{\Omega} \hat{U}_+ \quad (7.29)$$

が証明できます。^{20,21)}これは、時間発展演算子 \hat{U}_\pm を波動関数部分から演算子部分に移し、 $\hat{\Omega}$ のハイゼンベルグ表示と呼ばれる $\hat{\Omega}_H$ に時間依存性をすべて押し付け、時間を含まない波動関数 $\Psi(0)$ 、 $\Phi(0)$ を使った積分表式に書き換えたのです。

この形なら、全体の時間微分は積分内の演算子 $\hat{\Omega}_H(t)$ の時間微分だけに担われ、(それが観測量を表すか否かは別として) $d\hat{\Omega}_H(t)/dt$ が演算子として明確な意味をもちます。式(7.24)左辺の見かけ倒し演算子 $d\hat{\Omega}/dt$ とは性格が全く違います。さらに、時間依存波動方程式(7.4)を形式的に解けば $\hat{U}_\pm = e^{\mp i\hat{H}t/\hbar}$ も証明でき、これを式(7.29)に代入して時間微分すれば運動方程式(7.26)が得られます。^{20,21)}これは期待値関係式(7.24)と違い、完全な演算子関係式です。ランダウ-リフシッツもこの違いに注意を促しています。²¹⁾

7.8 ハイゼンベルグ後の不確定性関係

ここまでの不確定性関係の議論は、従来の多くの教科書と足並みをそろえ、多少あいまいな表現に従ってきました。この節では、最近の認識を踏まえ、少し立ち入った解説を行います。

量子系の物理量 A を観測すれば、観測装置が直ちにその量子系を乱し、 A と特別な関係にある物理量 B を不確定にします。ハイゼンベルグは種々の思考実験を精査し、いくつかの組み合わせ A, B につき、 A の測定精度(誤差) $\varepsilon(A)$ と B の乱れの大きさ $\eta(B)$ にはプランク定数 h により

$$\varepsilon(A)\eta(B) > h \quad (7.30)$$

と表される関係があると提唱しました。^{14,23)}これをハイゼンベルグの不確定性原理または不等式と呼びます。ただし、 h が厳密な下限というのではなく、ほぼそのくらいは上回るという大雑把な不等式で、 \hbar としても構いません。

典型的な例が γ 線顕微鏡による粒子の位置の測定です。位置 x を精度 $\varepsilon(x)$ で決めるには波長 $\lambda < \varepsilon(x)$ 程度の光を粒子に散乱させる必要があります。そのとき、その光子がもつ運動量 h/λ 程度の乱れ $\eta(p_x)$ を粒子の x 方向の運動量 p_x に与えてしまうため、 $\varepsilon(x)\eta(p_x) > h$ が結論されます。

逆に、励起原子が放出する光の周波数に現れるドップラー効果から原子の運動量を決める思考実験による位置の乱れを調べると、 x と p_x が入れ替わった不等式 $\varepsilon(p_x)\eta(x) > h$ が導けます。²³⁾

x と p_y 、 y と p_x 等々、異なる方向の位置座標と運動量成分については、互いに乱れを生みません。

もう一つの例は、ある軌道を回る粒子の角度位置 ϕ の測定が軌道面に垂直な角運動量成分 J_z に与える乱れ、あるいは J_z の測定が ϕ に与える乱れです。どちらも、測定精度と乱れの大きさの積は h や \hbar よりあまり小さくできません。

以上と全く異質なのが、各物理系に固有の物理量でもなく、妥当な演算子で表せもしない時間に関わるエネルギーとの不確定性関係です。これはかなり難しい問題で、量子論の初期から最近に至るまで種々の議論の歴史があります。²⁴⁾時

間差 Δt である系のエネルギーを2回精確に測っても $\hbar/\Delta t$ ほどの不一致は避けられない、短い時間間隔で測定してもエネルギーはほとんど決められないことをランダウ-リフシッツは示しています。²⁵⁾ 寿命 τ で崩壊する共鳴状態のエネルギー測定にそれ以上の時間をかけられないので、そのエネルギー準位には \hbar/τ ほどのあいまいさ、共鳴幅が避けられません(第9章)。また、単位時間当たりレート γ で電磁波を自然放出して基底状態に落ちる励起状態のエネルギー準位には自然幅 $\hbar\gamma$ ほどのあいまいさが避けられません。²⁶⁾

一つの物理系につき、ある精度での1回の観測とそれによる乱れの間接関係を表すのが不確定性原理(7.30)です。一方、これに見かけは似ていても明らかに物理的意味が違う不確定性関係があります。ある特定の量子状態 ψ にある同等で独立な多数の物理系につき、演算子 \hat{A} で表される物理量 A を精確に測定すると、測定値には ψ 特有の分布があり、その平均値は期待値 $\langle \hat{A} \rangle_\psi$ になります。一般に分布のゆらぎ(幅)を表す標準偏差

$$\sigma(A) = \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_\psi)^2 \rangle_\psi^{1/2} \quad (7.31)$$

は二つのエルミート演算子 \hat{A}, \hat{B} につき、不等式

$$\sigma(A)\sigma(B) \geq \frac{1}{2} \left| \langle \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \rangle_\psi \right| \quad (7.32)$$

を満たすことが量子論と無関係に、純粋に数学的に証明できます。^{13-15,27,28)} もしも \hat{A}, \hat{B} が先に述べた x と p_x のように互いに不確定性関係があれば、付録7Aの式(7A.2)により式(7.32)の右辺は $\hbar/2$ になり、ハイゼンベルグ不等式(7.30)に形式上、似ています。 \hat{A}, \hat{B} が不確定性関係をもたなければ右辺はゼロです。でも、式(7.32)はあくまでも分布の幅に関する関係で、測定精度 ε や乱れ η には関係がないにも拘わらず、しばしばこれが物理的な不確定性原理(7.30)を数学的に保証するかのよう誤解されています。

最近、ブランシヤール(Branciard)が不等式

$$\varepsilon(A)\sigma(B) + \sigma(A)\eta(B) \geq \frac{1}{2} \left| \langle \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \rangle_\psi \right|, \quad (7.33)$$

および、さらに強い不等式も提唱しました。^{29,30)} 実は、この左辺にさらに正である式(7.30)の左辺を加えた不等式を小澤が提案していましたが、式

(7.33)はその上を行くわけです。この分野では、小澤の一連の研究に刺激され、測定誤差や乱れの厳格な定義法の議論、各不等式の成立条件の吟味、ハイゼンベルグ不等式が破れる例、各種実験的検証の検討等々の研究が進みました。³⁰⁾

不確定性関係に関わる研究は、ミクロの世界をどこまで詳細に知ることができるかという基本的な問題として、また量子情報通信など応用分野にとっても重要です。

付録7A エネルギー保存、運動量保存

時間に依らず不変な量子論的物理量(保存量)を演算子の交換関係を使って議論します。時間を含まないある物理量演算子 $\hat{\Omega}$ とハミルトニアン \hat{H} とが可換、つまり $\hat{H}\hat{\Omega} = \hat{\Omega}\hat{H}$ が成り立つとします。このとき、式(7.24), (7.25)から、時間依存波動方程式(7.4)を満たす Ψ についての期待値 $\langle \hat{\Omega} \rangle_\Psi = \langle \Psi, \hat{\Omega}\Psi \rangle$ が時間に依らないこと、保存量であることが分かります。^{19,20)}

外部から何の力も受けないか、または時間に依らない外場しか受けていない系のハミルトニアン \hat{H} は時間を含みません。したがって、 $\hat{\Omega} = \hat{H}$ とすれば、エネルギー保存則が示されます。

次に、粒子 $i=1, 2, \dots$ から成る系に関する波動関数 $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots)$ にすべての粒子を同一微小量 $\delta\mathbf{r}$ だけ移動させる演算 \hat{O} を施してみると、

$$\begin{aligned} \hat{O}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) &= \psi(\mathbf{r}_1 + \delta\mathbf{r}, \mathbf{r}_2 + \delta\mathbf{r}, \dots) \\ &\simeq \left[1 + \delta\mathbf{r} \cdot \sum \nabla_i \right] \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) \end{aligned} \quad (7A.1)$$

と書けます。³¹⁾ 全粒子を等距離移動してもハミルトニアンは不変なので $\hat{O}(\hat{H}\psi) = \hat{H}(\hat{O}\psi)$ 、したがって物理量 \hat{O} は保存量で、 $\sum \nabla_i$ に比例する系の全運動量も保存量だと分かります。³¹⁾

なお、 $\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$ なら \hat{H} と可換な $\hat{\Omega}$ につき $\hat{H}(\hat{\Omega}\psi_n) = \hat{\Omega}(\hat{H}\psi_n) = E_n(\hat{\Omega}\psi_n)$ となり、 $\hat{\Omega}\psi_n$ は固有値 E_n をもつ \hat{H} の固有関数で、 ψ_n の定数倍なので、 ψ_n は $\hat{\Omega}$ の固有関数でもあります。ただし、 E_n が縮退していれば $\hat{\Omega}\psi_n \propto \psi_n$ とは限りません。その場合でも、縮退準位の適当な線形結合により $\hat{\Omega}$ の固有関数を作れます。³²⁾ こうして \hat{H} と $\hat{\Omega}$ が共通の固有関数群をもち、 $\hat{\Omega}$ が表す物理量をエ

エネルギーと同時に測定できることが分かります。同じことがどんな可換な二つの物理量演算子についても成り立ちます。³²⁾

逆に、不確定性関係のために同時測定ができない x と p_x 等、第7.8節で述べたいくつかの物理量の組み合わせについては交換関係

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = -i\hbar \quad (7A.2)$$

が導かれます。^{14, 15, 20, 33)} c_A, c_B を勝手な定数とすると $[\hat{A} - c_A, \hat{B} - c_B] = [\hat{A}, \hat{B}]$ が示せるので、量子状態 ψ による \hat{A} の期待値 $\langle \hat{A} \rangle_\psi$ を c_A , \hat{B} の期待値を c_B として採用すれば、

$$[\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_\psi, \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle_\psi] = -i\hbar \quad (7A.3)$$

も成り立つことが分かります。

付録 7B 重心運動と相対運動

質量 m_1, m_2 の粒子それぞれの重心の位置座標を $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$, 相対距離を $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, 2粒子の重心座標を \mathbf{R} , さらに各位置座標に対応する運動量演算子を $\hat{\mathbf{p}}_1, \hat{\mathbf{p}}_2, \hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{P}}$, 運動エネルギー演算子を $\hat{T}_1, \hat{T}_2, \hat{T}_r, \hat{T}_R$ と書き, $M = m_1 + m_2$ とします。

\mathbf{R}, \mathbf{r} の直交座標成分は

$$X = (m_1 x_1 + m_2 x_2) / M, \quad x = x_1 - x_2 \quad (7B.1)$$

等と書け, この変数変換により1階偏微分は

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial X}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial x}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{m_1}{M} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial x},$$

$$\frac{\partial}{\partial x_2} = \frac{\partial X}{\partial x_2} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial x}{\partial x_2} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{m_2}{M} \frac{\partial}{\partial X} - \frac{\partial}{\partial x}$$

となります。これらの和は $\partial/\partial X$ ですから

$$\begin{aligned} \hat{p}_{1x} + \hat{p}_{2x} &= -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x_2} \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial X} \\ &= \hat{P}_x \end{aligned}$$

が導け, これと y, z 成分の式をまとめれば運動量演算子の変換式

$$\hat{\mathbf{p}}_1 + \hat{\mathbf{p}}_2 = \hat{\mathbf{P}} \quad (7B.2)$$

が得られます。2階偏微分も同様にして

$$\begin{aligned} &\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \\ &= \left(\frac{\partial X}{\partial x_1} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial X^2} + 2 \frac{\partial X}{\partial x_1} \frac{\partial x}{\partial x_1} \frac{\partial^2}{\partial X \partial x} + \left(\frac{\partial x}{\partial x_1} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \\ &= \left(\frac{m_1}{M} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial X^2} + 2 \frac{m_1}{M} \frac{\partial^2}{\partial X \partial x} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \\ &= \left(\frac{\partial X}{\partial x_2} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial X^2} - 2 \frac{\partial X}{\partial x_2} \frac{\partial x}{\partial x_2} \frac{\partial^2}{\partial X \partial x} + \left(\frac{\partial x}{\partial x_2} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \\ &= \left(\frac{m_2}{M} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial X^2} - 2 \frac{m_2}{M} \frac{\partial^2}{\partial X \partial x} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \end{aligned}$$

と書けることを使えば、

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

が導けます ($\mu = [m_1^{-1} + m_2^{-1}]^{-1}$ は換算質量)。同様な y, z 成分の式もまとめれば各運動自由度が

$$\hat{T} = \hat{T}_1 + \hat{T}_2 = \hat{T}_R + \hat{T}_r \quad (7B.3)$$

と分離されます。式(7B.2), (7B.3)は古典的物理量の関係式と同じ形を取ります。

それぞれの粒子の内部運動のハミルトニアンを \hat{h}_1, \hat{h}_2 , 2粒子間の相互作用を \hat{V} とすると, 2粒子系のシュレーディンガー方程式は

$$\begin{aligned} E_{\text{tot}} \Phi &= [(\hat{T}_1 + \hat{h}_1) + (\hat{T}_2 + \hat{h}_2) + \hat{V}] \Phi \\ &= [\hat{T}_R + \hat{H}_r] \Phi, \end{aligned} \quad (7B.4)$$

$$\hat{H}_r = \hat{T}_r + \hat{h}_1 + \hat{h}_2 + \hat{V} \quad (7B.5)$$

と表せます。

2粒子系が外から力を受けなければ相互作用 \hat{V} は \mathbf{R} には依らず, 演算子 \hat{T}_R, \hat{H}_r は別々の変数で定義され, これらが表す運動は互いに分離されるはずで。そこで, 重心運動と相対運動を表すシュレーディンガー方程式

$$\hat{T}_R \phi = E_{\text{cm}} \phi, \quad (7B.6)$$

$$\hat{H}_r \psi = E_{12} \psi, \quad (7B.7)$$

を満たす解 ϕ, ψ を考えます。その積は

$$\begin{aligned} [\hat{T}_R + \hat{H}_r] \phi \psi &= (\hat{T}_R \phi) \psi + \phi (\hat{H}_r \psi) \\ &= (E_{\text{cm}} + E_{12}) \phi \psi, \end{aligned} \quad (7B.8)$$

と全2粒子系の方程式(7B.4)を満たします ($\Phi = \phi \psi$)。全エネルギー E_{tot} は重心の運動エネルギー E_{cm} と (両粒子の内部エネルギー $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ を含む) 相対運動の全エネルギー E_{12} の和になります。

重心運動(7B.6)は自由運動ですから, その運動エネルギー E_{cm} も運動量 \mathbf{P} も一定不変です。し

たがって、式(7B.2)により粒子1, 2の運動量の和 $\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2$ は古典論と同じく保存されます。また、2粒子の衝突による内部状態の遷移に必要なエネルギー移動は、エネルギー $E_{12} (= E + \varepsilon_1 + \varepsilon_2)$ を保存しつつ相対運動の運動エネルギー E の一部が使われて起こるものであり、重心運動エネルギー E_{cm} は使えないことが分かります。

自由運動(7B.6)の解は平面波と分かっているので、2体衝突問題は波動方程式(7B.7)を解くことに帰着します。内部状態をきちんと扱わない近似内での弾性散乱では、適当な有効相互作用 $V(\mathbf{r})$ のもとに、演算子 \hat{h}_1, \hat{h}_2 がないシュレーディンガー方程式(7B.7)を解けば済み、これは換算質量 μ に等しい質量の1粒子散乱問題

$$[-(\hbar^2/2\mu)\Delta + V(\mathbf{r})]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (7B.9)$$

と同等です。

第7章 文献・注

- 1) L. I. Schiff [5], §18.
- 2) 砂川重信 [2], §1.3.
- 3) 高柳和夫 [3], §1–3.
- 4) B. H. Bransden and C. J. Joachain [4], App. 2.
- 5) L. I. Schiff [5], §6.
- 6) L. I. Schiff [5], §5.
- 7) 高柳和夫 [3], §§2–2, 2–3.
- 8) B. H. Bransden and C. J. Joachain [4], §2.1.
- 9) 高柳和夫 [12], §2.2.
- 10) L. I. Schiff [5], §7.
- 11) B. H. Bransden and C. J. Joachain [4], §2.2.
- 12) 江沢洋 [1], §5.5.
- 13) L. I. Schiff [5], §12. 見かけは位置と運動量を扱っているが、式(7.32)の導出に関する限り、エルミート演算子一般に適用できる手法。
- 14) 江沢洋 [1], §6.4.
- 15) L. D. Landau and E. M. Lifshitz [8], §16.
- 16) 江沢洋 [1], §5.4.
- 17) 平衡位置からのずれに比例する復元力を受ける基底状態調和振動子を距離 A だけずらして置いた最小波束は、その幅も形も保ち、ぼやけずに、中心(=期待値)が古典粒子と同じ振動数

- と振幅 A で単振動運動する(L. I. Schiff [5], §13).
- 18) L. D. Landau and E. M. Lifshitz [8], §19.
- 19) L. D. Landau and E. M. Lifshitz [8], §9.
- 20) L. I. Schiff [5], §24.
- 21) L. D. Landau and E. M. Lifshitz [8], §13.
- 22) 谷村省吾, 素粒子論研究電子版 **10**, No.3 (2011).
- 23) L. I. Schiff [5], §§3, 4.
- 24) 谷村省吾, 素粒子論研究電子版 **16**, No.3 (2013).
- 25) L. D. Landau and E. M. Lifshitz [8], §44.
- 26) L. I. Schiff [5], §45.
- 27) E. H. Kennard, Z. Phys. **44**, 326 (1927).
- 28) H. P. Robertson, Phys. Rev. **34**, 163 (1929).
- 29) C. Branciard, Proc. Natl. Acad. Sci. **110**, 6742 (2013).
- 30) 枝松圭一他, 日本物理学会誌 **70**, 188 (2015).
- 31) L. D. Landau and E. M. Lifshitz [8], §15.
- 32) L. D. Landau and E. M. Lifshitz [8], §11.
- 33) W. Heisenberg, Z. Phys. **43**, 172 (1927).

8 低エネルギー衝突でも摂動論

— たかがボルン近似, されど…

8.1 クーロン散乱にボルン近似は暴論

高エネルギー散乱の表題のもとにボルン近似を説明する教科書を見かけます。これは誤った印象を与えかねません。低エネルギー衝突に使っている例を見て、ひどいことをするものだとバカにする人が出るかも知れません。しかし、ボルン近似は単なる1次摂動論です。散乱振幅などをポテンシャルの強さにつきべき級数展開した、いわゆるボルン級数の初項です。この級数が収束し、初項だけでほぼ再現できるぐらいポテンシャルの効果が弱ければかまわないのです。高エネルギー衝突との条件が必須なわけではありません(第8.6, 8.7節)。低エネルギー散乱でボルン級数が収束する条件も導けます(第8.8節)。

逆に、高エネルギー衝突でもボルン級数が発散すれば論理的にボルン近似は破綻します。あらゆるエネルギーでラザフォード断面積を再現するクーロン散乱のボルン近似も、実はそんな、

理論的根拠のない暴論です。2次ボルン項が無限大になるのですから(第8.8節), 1次で済まそうなぞ論外です。高エネルギーになればなるほど1次ボルン項に2次項が勝る妙な例もあります(第8.8節)。衝突エネルギーに係わらずボルン断面積がゼロで使い物にならない過程もあります(第8.8節)。ボルン近似は単純なようで結構やっかいです。まずは第8.2-8.4節で物理的解釈に注意しつつボルン近似を入門的に解説します。

8.2 ボルン近似は相互作用の運動量表示

考えている物理系のハミルトニアン \hat{H} を基本(無摂動)部分 \hat{H}_0 と弱い摂動 \hat{H}' に $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$ と分解しましょう。ポテンシャル場 $V(\mathbf{r})$ による質量 μ の粒子の散乱なら運動エネルギー演算子 $\hat{T} = -(\hbar^2/2\mu)\Delta_{\mathbf{r}}$ を \hat{H}_0 として選び, $V(\mathbf{r})$ をかける演算子 $\hat{V}(\mathbf{r})$ を摂動として扱います。また, 相対距離ベクトル \mathbf{r} に依る相互作用 $V(\mathbf{r})$ を及ぼし合う2粒子間の弾性衝突では, 換算質量を μ とし, 相対運動エネルギー演算子 $\hat{T} = -(\hbar^2/2\mu)\Delta_{\mathbf{r}}$ を \hat{H}_0 として, $\hat{V}(\mathbf{r})$ を摂動とします(付録7B)。

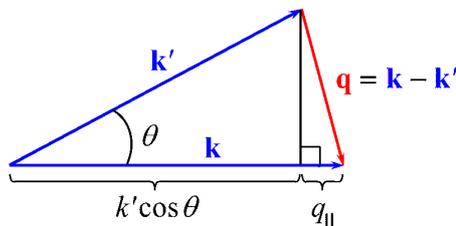


図20. 入射波, 散乱波の運動量と移行運動量 \mathbf{q} .

無摂動状態 (\hat{T} の固有関数) の平面波 $\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ から別の平面波 $\exp(i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r})$ への遷移を考えます。 \mathbf{r} に関する運動の運動量ベクトル変化(図20)

$$\hbar\mathbf{q} = \hbar\mathbf{k} - \hbar\mathbf{k}' \quad (8.1)$$

を移行(移動)運動量と呼びます。¹⁾ これは非弾性衝突でも同じように定義できます。仲間内では原語 momentum transfer の語順通り直訳して「運動量移行」と呼んでいます。でも, \mathbf{q} は「移行」なんていう物理量ではなく運動量なのですから, 当然, 「移行運動量」です。なお, \hbar は本質的では

ないですし, 原子単位では1なので, 波数と運動量を区別しない言葉遣いをしばしばします。

始め \mathbf{k} 方向に, 遷移(散乱)後には \mathbf{k}' 方向に運動するので, ベクトル \mathbf{k}, \mathbf{k}' の間の角度が散乱角 θ で, 弾性散乱 $k' = |\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}| = k$ なら

$$q = 2k \sin(\theta/2) \quad (8.2)$$

と書けます。直進(前方)運動量損失割合 $q_{||}/k$, つまり移行運動量ベクトル \mathbf{q} の初期運動方向成分 $q_{||} = k - k' \cos \theta$ (図20)の k に対する比を角分布 $d\sigma/d\omega$ で平均すれば直進運動量移行断面積

$$\sigma_m = \int \left(\frac{q_{||}}{k} \right) \frac{d\sigma}{d\omega} d\omega = \int \left(1 - \frac{k'}{k} \cos \theta \right) \frac{d\sigma}{d\omega} d\omega \quad (8.3)$$

を得ます。むろんこれはボルン近似の成立, 破綻に係わらず一般に定義される断面積で, ふつう微分断面積に並んで(あまり意味の説明なしに)定義されています。弾性散乱なら $k'/k = 1$ です。

運動量が $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$ と変わるポテンシャル散乱の微分断面積 $d\sigma(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}')/d\omega$ は摂動 $\hat{V}(\mathbf{r})$ による平面波間の遷移確率に比例します。1次摂動論では

$$\frac{d\sigma^B(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}')}{d\omega} = |f^B(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}')|^2, \quad (8.4)$$

$$f^B(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') = C_a (e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} | \hat{V}(\mathbf{r}) | e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}) \quad (8.5)$$

$$= C_a \int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (8.6)$$

と表せ, 散乱振幅 $f^B(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}')$ の係数は

$$C_a = -\mu / (2\pi\hbar^2) \quad (8.7)$$

となるのが理論的に導けます。¹⁻⁵⁾ 球対称ポテンシャルの場合, 角度積分を済ませると

$$f^B(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') = \frac{4\pi C_a}{q} \int_0^\infty r \sin qr V(r) dr \quad (8.8)$$

に帰着します。

式(8.5)で $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ の代りに散乱の効果を含む正しい波動関数 $\psi(\mathbf{r})$ を使えば正しい散乱振幅が得られることが知られています。^{1,2,6,7)} 逆に, その正しい式で $\psi(\mathbf{r})$ を無摂動の $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ で近似したのが $\hat{V}(\mathbf{r})$ の1次まで正しい散乱振幅の近似式(8.5), (8.6)だと言えます。 $\psi(\mathbf{r})$ を $\hat{V}(\mathbf{r})$ につき摂動展開して $n-1$ 次まで取り入れたものを使えば n 次まで正しい第 n 次ボルン近似の散乱振幅を得ます。

式(8.4)～(8.8)を第1次ボルン近似, 略してボルン近似, また平面波ボルン近似とも呼びます.

$V(\mathbf{r})$ の漸近形がクーロン型なら, \hat{H}_0 としてクーロン相互作用下でのハミルトニアンを使い, 残りの短距離型ポテンシャル $v(\mathbf{r})$ をかける演算子 $\hat{v}(\mathbf{r})$ を \hat{H}' とすべきです. それを無摂動のクーロン波動関数二つで挟み積分すれば, $\hat{v}(\mathbf{r})$ についての1次摂動近似, クーロン波ボルン近似を得ます.

$V(\mathbf{r})$ を C 倍すれば散乱振幅(8.6), (8.8)も C 倍, 断面積(8.4)は $|C|^2$ 倍されて $V(\mathbf{r})$ の符号に依りません. 2次ボルン近似の散乱振幅は $\hat{V}(\mathbf{r})$ の1次と2次の項の和なので微分断面積はその交差項, $\hat{V}(\mathbf{r})$ の3次項を含み, $V(\mathbf{r})$ の符号に依ります. この事情は次節で述べる一般の散乱問題でも同じです. 例えば, 静電相互作用の符号が逆の電子衝突と陽電子衝突の直接過程の断面積がある衝突エネルギー以上で一貫して等しければ, そこでは1次ボルン近似が成立し, 2次ボルン効果は無視できると推定されます.

微分断面積 $d\sigma/d\omega$ は一般に散乱エネルギー E と散乱角との2変数関数ですが, $V(\mathbf{r})$ が球対称ならボルン近似(8.4)は q にしか依りません. ボルン近似が成り立てば, 異なる E での $d\sigma/d\omega$ をそれぞれ q の関数として描いた曲線は一つの普遍曲線に乗ります. 逆に, 普遍曲線に乗ることが確認できればボルン近似が成立すると推定されます.

式(8.6)は定数係数を除き相互作用 $V(\mathbf{r})$ のフーリエ逆変換です(第1章付録1A). つまり, ボルン散乱振幅の本質は相互作用 $V(\mathbf{r})$ の運動量表示なのです. $V(\mathbf{r})$ の運動量分布の各 $-\mathbf{q}$ 成分が移行して散乱 $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}' = \mathbf{k} - \mathbf{q}$ を起こし, この運動量分布に比例した散乱振幅 $f^B(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}')$ を生じるのです.

例として, 電荷 Ze の原子核をもつ中性原子による電荷 ze の荷電粒子の弾性散乱を考えます. 入射粒子が核の近くに達したときには有効相互作用は $V(r) \simeq V_C(r) = zZe^2/r$ と考えられ, 核から離れていくと原子内電子による核電荷の遮蔽により $V(r) = V_{sc}(r) = V_C(r)e^{-\kappa r}$ という形が妥当でしょう. この遮蔽クーロン相互作用 $V_{sc}(r)$ は小さな r では遮蔽が無視でき, V_C に近づきます.

$V_{sc}(r)$ を式(8.8)に代入して積分すると

$$f^B(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') = -\alpha/(q^2 + \kappa^2) \quad (8.9)$$

$$\simeq -\alpha/q^2 \quad (q^2 \gg \kappa^2 \text{ のとき}), \quad (8.10)$$

$$\alpha = 2\mu zZe^2/\hbar^2 \quad (8.11)$$

となります. 入射粒子が核に接近してほとんどクーロンポテンシャル $V_C(r)$ そのものを受け, 大きな運動量 $\hbar q$ ($q^2 \gg \kappa^2$)を移行させるときには散乱振幅は式(8.10)のようになります. 式(8.2)に注意すれば, これは付録6Aの f_C^B を再現することが分かります.

ポテンシャル $V_C(r) \propto r^{-1}$ の形をそのまま式(8.8)に代入すると不定積分は $\propto \cos qr$ で, 積分上限を大きくした極限值は決まりません. それでも, $\kappa \rightarrow 0$ として得られる式(8.10)をふつうボルン近似でのクーロン散乱振幅と称します.

式(8.10)は実数で, 位相は間違いですが, ラザフォード断面積は再現します(第6.1節, 第6章付録6A). これを相互作用の長距離性から説明する向きもありますが, 教科書[2]はこれを全くの偶然と断じます(第8.8節).³⁾ なお, 短距離型ポテンシャルが混じるとその効果との干渉を表す上でクーロン散乱振幅の位相の誤りは深刻です. 同種粒子同士の衝突でも位相の誤りが本来は顕著な干渉効果を消してしまいます(第6.3節).

8.3 非弾性過程のボルン近似

電子, 陽電子, 陽子, 反陽子, 裸の原子核など単一粒子との衝突による中性原子の励起, 脱励起を考えます. 入射粒子と原子との相互作用 $\hat{V}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_t)$ は原子核-入射粒子間の相対座標 \mathbf{r} と原子内諸電子の座標(すべて含めて一つの文字 \mathbf{r}_t で代表)との関数で, これを摂動と見なします. 無摂動系は状態 n にある孤立原子 $\phi_n(\mathbf{r}_t)$ と, それと相互作用せず自由運動をする相対運動の平面波 $\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ です. 両方の運動が独立なので無摂動系の全波動関数はそれぞれの波動関数の積になります(第7章付録7B). したがって, 前節と同様に1次摂動論から次の平面波ボルン近似が得られます:

$$\frac{d\sigma^B(n\mathbf{k} \rightarrow n'\mathbf{k}')}{d\omega} = \frac{k'}{k} |f^B(n\mathbf{k} \rightarrow n'\mathbf{k}')|^2, \quad (8.12)$$

$$f^B(n\mathbf{k}\rightarrow n'\mathbf{k}') = C_a(\phi_{n'}(\mathbf{r}_t)e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}|\hat{V}(\mathbf{r},\mathbf{r}_t)|\phi_n(\mathbf{r}_t)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}) \quad (8.13)$$

$$= C_a \int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \mathcal{V}_{n'n}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (8.14)$$

$$\mathcal{V}_{n'n}(\mathbf{r}) = \int \phi_{n'}^*(\mathbf{r}_t)\hat{V}(\mathbf{r},\mathbf{r}_t)\phi_n(\mathbf{r}_t) d\mathbf{r}_t. \quad (8.15)$$

状態 n から n' への遷移を起こす有効ポテンシャル $\mathcal{V}_{n'n}(\mathbf{r})$ についての1次摂動近似(8.6)という物理的意味を式(8.14)は表し、その本質は $\mathcal{V}_{n'n}(\mathbf{r})$ の運動量表示で、移行運動量ベクトル \mathbf{q} だけの関数になります。標的がランダムな向きを向いていればそれにつき微分断面積(8.12)を平均すると \mathbf{q} の大きさ q だけの1変数関数になります。⁸⁾

入射粒子にも内部構造があれば、その初期状態と終状態の波動関数をそれぞれ $\phi_n(\mathbf{r}_t)$, $\phi_{n'}(\mathbf{r}_t)$ にかけておけばその遷移も同時に扱えます。

ここまでは相互作用の具体形について何も指定しておらず、ごく一般的な話です。変数 \mathbf{r}_t や波動関数 $\phi_n(\mathbf{r}_t)$ の定義を適切に変更すれば、原子標的に限らず、例えば断熱近似が妥当な分子の振動状態遷移、回転状態遷移や、電子・振動・回転運動が結合した断熱近似なしの分子状態間の遷移にも使えます。もちろん、原子系、分子系に限らず、一般の量子論的散乱の摂動論です。

式(8.14)は \mathbf{r}_t についての積分(8.15)を先に行った結果です。しかし、荷電粒子衝突による原子や分子の電子状態遷移では衝突相互作用が個々のクーロン相互作用の和で、このとき逆に \mathbf{r} の積分を先に行うと別の物理的意味が見えてきます。

8.4 荷電粒子による電子状態遷移

一つの標的内電子の座標を \mathbf{r}_i 、これと電荷 ze の入射粒子との相対距離ベクトルを $\mathbf{x}_i = \mathbf{r} - \mathbf{r}_i$ とし、その間に働くクーロン相互作用 $V_C(x_i) = -ze^2/x_i$ につき、当面固定した \mathbf{r}_i を原点に選び直して、つまり積分変数を \mathbf{r} から \mathbf{x}_i にすり替えて式(8.13) (のうち電子 i に関するポテンシャルの項)に含まれる \mathbf{r} 積分を行うと、

$$\begin{aligned} C_a(e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}|\hat{V}_C(x_i)|e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}})_{\mathbf{r}} &= C_a \int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} V_C(x_i) d\mathbf{r} \\ &= C_a e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i} \int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}_i} V_C(x_i) d\mathbf{x}_i = -(\alpha/q^2)e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i} \end{aligned} \quad (8.16)$$

を得ます。最後の等式には式(8.10)を使いました。変数 \mathbf{r} で積分したので相対運動の平面波 $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ が消えるのは当然ですが、代りに標的内電子に関する $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i}$ が現れることがポイントです(次節)。

残った仕事は式(8.16)を標的内全電子 i につき加え合せることと、 $\phi_{n'}^*(\mathbf{r}_t)\phi_n(\mathbf{r}_t)$ をかけて \mathbf{r}_t で(すべての \mathbf{r}_i で)積分することで、結局、

$$f^B(n\mathbf{k}\rightarrow n'\mathbf{k}') = -(\alpha/q^2)\epsilon_{n'n}(\mathbf{q}) \quad (n' \neq n), \quad (8.17)$$

$$\epsilon_{n'n}(\mathbf{q}) = \left(\phi_{n'} \left| \sum e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i} \right| \phi_n \right) \quad (8.18)$$

を得ます。⁸⁻¹⁰⁾ ただし、この α は式(8.16)の $V_C(x_i)$ から来ているので、式(8.11)で $Z = -1$ とする必要があります。入射粒子と標的原子核の相互作用を落しましたが、 $n' \neq n$ の場合に話を限れば、その \mathbf{r}_t 積分は $\phi_{n'}(\mathbf{r}_t)$ と $\phi_n(\mathbf{r}_t)$ の直交性からゼロになり、この相互作用は効きません。

散乱振幅(8.17)は二つの因子をもちます。一つは個々の標的内電子を自由粒子としたときのクーロン散乱振幅(8.10)で、当然、原子構造に依りません。もう一つは電子が束縛を受けている効果を表し、クーロン散乱により入射粒子の運動量の一部 \mathbf{q} が標的内電子に移るとき標的が遷移 $n \rightarrow n'$ を起こす遷移振幅 $\epsilon_{n'n}(\mathbf{q})$ で、非弾性散乱形状因子と呼ばれます。標的のランダムな向きにつき $|\epsilon_{n'n}|^2$ を平均したものを $\mathcal{E}_{n'n}$ と書くと、これは \mathbf{q} の大きさ q だけの関数になり、微分断面積は

$$\frac{d\sigma^B(n\mathbf{k}\rightarrow n'\mathbf{k}')}{d\omega} = \left(\frac{k'}{k} \right) \frac{\alpha^2}{q^4} \mathcal{E}_{n'n}(q) \quad (8.19)$$

と表せます。微分断面積は一般に E と θ の関数ですが、ボルン近似では(因子 k'/k を除き)1変数 q だけの関数になることはポテンシャル散乱と同じです。一定散乱角 θ では、衝突エネルギー E が高ければ $q^{-4} \propto k^{-4} \propto E^{-2}$ と言えます(図20)。

8.5 ボルン近似成立時、破綻時の光学極限

q が小さいとき式(8.18)で $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i} \simeq 1 + i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i$ が使え、また1の積分は状態 n, n' 間の直交性で消え、

$$\lim_{q \rightarrow 0} \frac{\mathcal{E}_{n'n}(q)}{(qa_0)^2} = \left| \left(\phi_{n'} \left| \sum \frac{z_i}{a_0} \right| \phi_n \right) \right|_{\text{平均}}^2 \quad (8.20)$$

を得ます。右辺は標的のランダムな向きにつき平均します。両辺を無次元量にすべくボーア半

径 a_0 を挿入しました。 z_i は電子 i の座標成分で、電子と電磁波の相互作用を決める双極子モーメント $-ez_i$ に比例するので、式(8.20)の右辺にリユードベリ単位 $R (= 13.6 \text{ eV})$ の遷移エネルギー $\Delta E_{n'n}/R$ をかけると双極子振動子強度(dipole oscillator strength, DOS) $f_{n'n}$ になります。そこで1変数 q だけの関数である一般化振動子強度(generalized oscillator strength, GOS)^{8, 10, 11)}

$$F_{n'n}(q) = \frac{\Delta E_{n'n} \mathcal{E}_{n'n}(q)}{R (qa_0)^2} = \left(\frac{k}{k'}\right) \left(\frac{q}{\alpha a_0}\right)^2 \frac{\Delta E_{n'n}}{R} \frac{d\sigma^B(n\mathbf{k} \rightarrow n'\mathbf{k}')}{d\omega} \quad (8.21)$$

を定義すると、その $q \rightarrow 0$ の極限がDOSです：

$$\lim_{q \rightarrow 0} F_{n'n}(q) = f_{n'n}. \quad (8.22)$$

光学的禁制遷移ではこの極限は当然ゼロです。

GOSもDOSと同様、無次元量です。DOSを連続状態を含め全終状態 n' に亘り加えれば原子内電子数 N_e になるというトーマス-ライヒェ-クーン(Thomas-Reiche-Kuhn, TRK)総和則をGOSに拡張したベーテ(Bethe)総和則

$$\sum_{n'} F_{n'n}(q) = N_e \quad (8.23)$$

が各 q の値につき成り立ちます。^{8, 12)}

GOSの式(8.21)中でボルン近似微分断面積の代りに精確と思われる微分断面積を使って得られる $\mathcal{F}_{n'n}(q, E)$ を「見かけの」一般化振動子強度(apparent GOS)と呼びます。これは一般に相対運動エネルギー E と散乱角 θ , または E と移行運動量 q の2変数関数です。しかし、高エネルギー領域で $\mathcal{F}_{n'n}(q, E)$ が E に依らない q の普遍関数になれば、これが本当のGOS, $F_{n'n}(q)$ に一致し、ボルン近似が成り立つと推定してよいでしょう。その意味で、 $\mathcal{F}_{n'n}(q, E)$ は理論計算を全く使わずに測定された微分断面積だけに基づいてボルン近似の妥当性を推定できる便利な道具です。

さらに、見かけのGOSは驚くべき性質を持ちます。ボルン近似が成り立たないどんな低エネルギー E でも、ラセター(Lassettre)の定理^{8, 13)}

$$\lim_{q \rightarrow 0} \mathcal{F}_{n'n}(q, E) = f_{n'n} \quad (8.24)$$

が保証されるのです。ボルン近似が成立するかどうか気にせず測りやすいエネルギーで微分断面積を決めれば、極限操作でDOSが、そして光吸収断面積が得られるのです。

ただ、式(8.22), (8.24)の極限 $q \rightarrow 0$ は実際はあり得ません。移行運動量がゼロなら移行エネルギーもゼロで、原子は励起しません。極限 $\theta \rightarrow 0$ での q の最小値は、図20とエネルギー保存則から

$$q_{\min} = |k - k'| = \frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{|\Delta E_{n'n}|}{k + k'} > 0 \quad (8.25)$$

となり、決してゼロになりません。 $q \rightarrow 0$ は関数形を維持しながらの数学的操作に過ぎません。

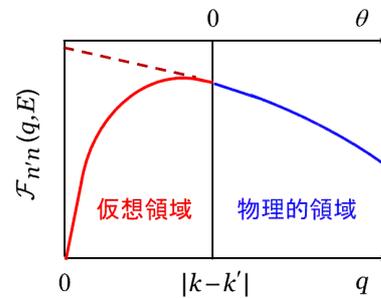


図21. ラセター定理の誤った応用例。禁制遷移の見かけの一般化振動子強度 $\mathcal{F}_{n'n}(q, E)$ が移行運動量 q の仮想領域に極大をもつとき物理的領域での実測値を点線のように外挿すれば誤り。一般化振動子強度 $F_{n'n}(q)$ でも事情は同じ。

光学的禁制遷移で $q \rightarrow 0$ とともに $\mathcal{F}_{n'n}(q, E)$ がゼロに近づく振舞が図21のように $q < |k - k'|$ (仮想領域)で初めて現れる場合、実現できる q の範囲内(物理的領域)での値を破線のように外挿すれば許容遷移と間違えてしまいます。許容遷移でも、仮想領域での $\mathcal{F}_{n'n}(q, E)$ の形によっては物理的領域での情報だけから決めた極限值は間違いかも知れません。GOS, $F_{n'n}(q)$, についても同じ注意が必要です。小さな q に鋭いピークがあるのに、それより大きな q でしか実測値がなければ誤った外挿を行いかねない許容遷移、禁制遷移のGOSの実例も知られています。¹⁴⁾ただ、式(8.25)によれば、電子、陽電子等の軽い粒子が励起しきい値よりかなり高いエネルギーで衝突するときには q_{\min} は小さく、小角まで測定すれば多くの場合、極限操作が信頼できます。

なお、近似的には禁制遷移のように見えても、正確には許容遷移になる例がいろいろあります。例えば、式(8.20)右辺の双極子演算子は1電子演算子で、1光子過程では1電子しか励起、脱励起できません。でも、実際には原子や分子の独立電子近似からのずれ、電子相関効果により2電子励起配置が光学的許容状態に混じり、2電子励起が起り得ます。この事情はやはり1電子演算子である $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i}$ でも同じで、非弾性散乱形状因子(8.18)内の標的波動関数に生ずる電子相関効果により2電子励起が見られます。

相対論補正で光学的禁制状態に許容状態が混じったり、分子の振動運動と電子運動が絡んで(振電結合, vibronic coupling)混じることもあります。GOSの q 依存性にも、禁制遷移型の極大と許容遷移的に小さな q で一定値に近づく形が共存することもあります。そんな場合でも、 $q \rightarrow 0$ で光学極限に近づく一般則は、当然、破れません。

8.6 低エネルギー電子-分子衝突

双極子モーメント \mathbf{D} をもつ中性極性分子と低エネルギー電子との静電相互作用は漸近形

$$V(\mathbf{r}) \sim V_d(\mathbf{r}) = -e\mathbf{r} \cdot \mathbf{D}/r^3 \quad (8.26)$$

を取ります。 \mathbf{r} は分子の重心から測った入射電子の位置ベクトルです。これは非常に長距離型のポテンシャルで、分子から遠く離れた道筋を通る電子(遠方衝突)でもすそ野部分の弱い相互作用によりわずかに散乱されます(図22)。この弱い小角散乱は摂動論、つまりボルン近似で良く近似されるはずで、

双極子相互作用(8.26)は \mathbf{D} の向き(分子の向き)に依るので、その力を受ければ分子の回転運動が影響を受けます。 $^1\Sigma$ 状態の2原子分子か線形分子ならその回転状態(j, m)は線形回転子、つまり球面調和関数 $Y_{jm}(\Theta, \Phi)$ で表せるのでそれを回転遷移の始状態、終状態としてポテンシャル(8.26)とともに遷移ポテンシャル $V_{j'm',jm}(\mathbf{r})$ の式(8.15)に代入し(\mathbf{r}_t が (Θ, Φ) に、 ϕ_n が Y_{jm} に対応)、それに基づき散乱振幅(8.14)を計算します。縮退回転副準位 m を区別しなければ(第0.11節)

$$\frac{d\sigma^B(j \rightarrow j')}{d\omega} = \frac{4}{3} \left(\frac{k'}{k}\right) \frac{j_{>}}{2j+1} \frac{(D/ea_0)^2}{q^2} \delta_{j',j\pm 1} \quad (8.27)$$

が得られます。¹⁵⁾ ここで $j_{>} = \max\{j, j'\}$ です。双極子相互作用の1次摂動なので、回転量子数変化 Δj が ± 1 の非弾性遷移だけが許されます。

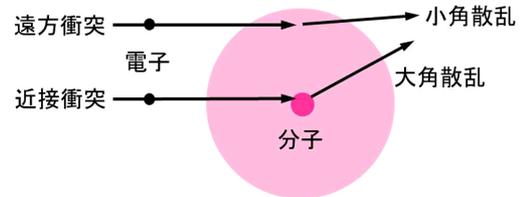


図22. 極性分子による電子の散乱。分子内を通る近接衝突・大角散乱と双極子相互作用のすそ野を通る遠方衝突・小角散乱を示す。

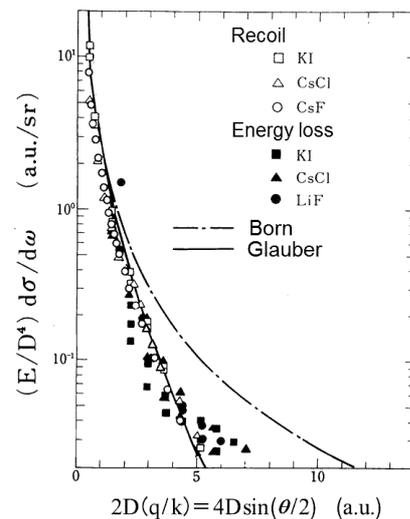


図23. 極性分子による1.8~20eVの電子の散乱: 換算移行運動量に対する換算微分断面積(回転遷移の総和)。記号: 電子エネルギー損失分光法と分子の反跳を測る手法とによる3分子の結果。---: 相互作用(8.26)による1次ボルン近似。—: 高次効果の近似的補正を行った結果。

q の小さな小角散乱、遠方衝突ほどその幾何学的有効面積が大きく、弱い散乱でも多く寄せ集めて微分断面積を大きくします。大きな断面積でも強い散乱を意味せず、ボルン近似を破綻させません。非弾性散乱なので $\theta \rightarrow 0$ でも q はゼロでない最小値 q_{\min} に近づき(第8.5節)、断面積は有限です。ただ、回転準位間隔は非常に狭いので q_{\min} は小さく、 $\theta \rightarrow 0$ で巨大断面積が現れます。

極性の強い3種の分子による電子の散乱を電子エネルギー損失分光法と分子の反跳を測る方法とで回転遷移を分離せずに測った結果を換算移行運動量に対する換算微分断面積として図23に示します.¹⁵⁾ 測定不能な極端に前方の散乱以外では成り立つ近似 $k' \simeq k$ のもとでは、これらの換算量を使うと D や E の異なるボルン断面積(8.27)を一つの普遍曲線で表せます。また、 $k' \simeq k$ なら、ボルン近似の成立如何を問わず、終状態 j' につき足し合せた断面積は一般に始状態 j に依らないことが証明できるので、気体分子が多くの j に亘って分布していることを気にせずに測定値と理論値を比較できます。¹⁵⁾ 図の実験値は小角ではボルン近似の一点鎖線に乗り、 θ が増えると高次項を近似的に取り入れた実線に沿っています。

分子気体中で分子はランダムな向きを向いているのだから、入射電子との双極子相互作用(8.26)は向きで平均され、ほとんどゼロになるのではないかとよく質問されます。実際は、個々の分子は衝突時間中ほとんど回転せず、ほぼ特定の向き Ω に固定されたまま相互作用を受けて電子散乱を起こします。その散乱振幅 $f(\Omega)$ を回転の始状態 $\Gamma_i(\Omega)$ 、終状態 $\Gamma_f(\Omega)$ で $\int \Gamma_f^*(\Omega) f(\Omega) \Gamma_i(\Omega) d\Omega$ と平均すれば回転遷移の散乱振幅が得られます。散乱電子の速い運動と遅い回転運動を分離するこの手法(断熱回転近似)がランダムな向きの妥当な処理法です。個々の散乱の扱いで相互作用自体を向きで平均してはいけません。

8.7 低エネルギーしきい則

しきい値 E_{th} 以上のエネルギー E でのみ起こり得る励起過程の断面積は、励起後の散乱粒子と標的との相対運動で許される最小角運動量子数を l' とすると、 $E - E_{th}$ が小さい限り

$$\sigma \propto (E - E_{th})^{l'+1/2} \quad (8.28)$$

と書けるといふ、相互作用が短距離型のときに成り立ついわゆるウィグナー(Wigner)のしきい則があります。¹⁶⁾ 「ウィグナーが導いた」法則だとしてある文献、教科書も見かけますが、原論

文¹⁶⁾にはこれは周知の事実で多くの論文に示されていると書いてあります。

なお、しきい値 E_{th} より下ですでに起きている別のチャンネルの断面積に $E = E_{th}$ で尖点(cusp)が現れることが論文16)に2段組で10行ほど触れられており、これは重要でないでこれ以上論じないとしてあります。しかし、これこそ後に活発に議論される有名なウィグナーカuspです。あまり引用されないバズィ(Baz')の論文に詳しい議論があり、¹⁷⁾ ランダウ-リフシッツの教科書もバズィ論文と同じ図により解説しています。¹⁸⁾

それはともかく、ウィグナー則(8.28)によれば E_{th} 近くの E では断面積は小さく、低エネルギーでも摂動近似が使えます。ボルン近似(8.13)で平面波 $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ 、 $e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}$ を球ベッセル関数 $j_l(kr)$ 、 $j_{l'}(k'r)$ で表される部分波に分解し、¹⁹⁾ $k'r \propto (E - E_{th})^{1/2}r$ が小さいときの主要項による近似 $j_{l'}(k'r) \propto (k'r)^{l'}$ を使います。相互作用 $V_{n'n}(\mathbf{r})$ が短距離型なら \mathbf{r} での積分は有限範囲内だけで重要なので、 k' が小さければ小さい $k'r$ しか積分(8.13)に効かないからです。すると散乱振幅の部分波成分 (l', l) は

$$f_{l'l}^B \propto \int_0^\infty (k'r)^{l'} j_l(kr) V_{n'n}(\mathbf{r}) r^2 dr \propto k'^{l'} \quad (8.29)$$

と分かります。最小の l' の項が主要項なので、励起断面積は $(k'/k) |f_{l'l}^B|^2 \propto k'^{(2l'+1)}$ と書け、式(8.28)がボルン近似により導けました。

なお、ウィグナー則の長距離力への修正版もボルン近似を使って導かれています。²⁰⁾

8.8 高エネルギーでも無用のボルン近似

ボルン近似の成立条件、ボルン級数の収束条件の厳密な議論は難しい問題ですが、ポテンシャル散乱での簡単な物理的考察例があります。断面積や散乱振幅を直接調べず、波動関数 $\psi(\mathbf{r})$ の平面波からのずれが小さければ $\psi(\mathbf{r})$ のボルン級数が収束し、散乱振幅も収束するはずという十分条件の議論で、強さ $\sim V_0$ 、到達距離 $\sim a$ の短距離型ポテンシャルなら、質量 m の粒子につき、
低エネルギー散乱条件: $V_0 a^2 / (\hbar^2/m) \ll 1$,
高エネルギー散乱条件: $V_0 a^2 / (\hbar^2/m) \ll ka$ (8.30)

が得られます。^{3,5)} 第一の条件はエネルギーに依らず、低エネルギー散乱に適用できます。高エネルギー散乱では第二の条件がより役立ち、ポテンシャル領域を粒子が通過する時間 $\tau \sim a/v$ に関する条件 $\tau V_0 \ll \hbar$ にも書き換えられます。また、球対称ポテンシャル $V(r)$ が遠方で r^{-3} よりも早く減衰し、原点で r^{-2} よりも特異性が弱く、また $-|V(r)|$ が束縛状態を持てなければ、あらゆるエネルギーでボルン級数が収束します。⁴⁾

1次ボルン断面積がゼロで役立たない例もあります。水素型の量子状態 $\phi_{nl}(\mathbf{r}_t)$ をもつ電子と陽電子の束縛系、ポジトロニウムPsの原子による散乱です。逆電荷の2粒子との相互作用が打ち消し合うのさ、という安易なあてずっぽうはいけません。電子-陽電子間距離ベクトル \mathbf{r}_t を $-\mathbf{r}_t$ に反転すると2粒子が入れ替り、原子との相互作用は符号が逆転します。この反転に対する $\phi_{nl}(\mathbf{r}_t)$ の偶奇性は方位量子数 l の偶奇と同じです。同じ偶奇性をもつPs状態間の遷移($\Delta l = \text{偶数}$)では式(8.15)に相当する \mathbf{r}_t 積分は選択則によりゼロで、ボルン断面積もゼロです。でも、 $\Delta l = \text{奇数}$ の遷移なら1次ボルン近似でも起こるのです。

平面波ボルン近似がラザフォード断面積を再現するのは「全く偶然の一致」との砂川の教科書[2]の指摘(第8.2節)に戻ります。³⁾ その根拠は、2次ボルン近似項の段階ですでに無限大になってしまうので、ボルン級数自体、無意味であるということです。遮蔽クーロンポテンシャル $Ce^{-\kappa r}/r$ の2次ボルン近似で極限 $\kappa \rightarrow 0$ を取っても起こる正真正銘の発散です。⁴⁾ そもそもクーロンポテンシャルに対する波動関数はいかに遠方でも決して平面波に近づかないのですから(第0.6節, 第6章付録6A), 平面波を無摂動波動関数とするボルン近似には論理的に無理があります。実験結果や正しい理論結果をよく再現する理論を短絡的に信頼してはならない多くの例の一つです。しかも、古典論でもラザフォード断面積がそのまま導かれ、それが物理学の歴史をある意味、支配してきたのですから、世の中、何とも皮肉なものです(第6.1節)。

イオン-原子衝突の電子移行後のチャンネルやイオン-イオン衝突に現れる漸近的クーロン力を無摂動状態に含めないで2次摂動項が破綻することは1960年代には分かっていました。²¹⁻²³⁾ しかし、80年代にメイセク(Macek)らが提案し、多くの実験結果を良く再現するとして評価されていたstrong-potential Born近似はクーロン場を正當に扱っておらず、実は無限大になる2次摂動項を近似計算して尤もらしい値を出しているとの指摘があり、この重大さが再認識されました。²³⁾

漸近的クーロン相互作用に煩わされない過程でも、中性原子から1価イオンへの電子移行(電荷移行)過程 $A^+ + B \rightarrow A + B^+$ のような粒子交換があるいわゆる組替え衝突のボルン級数は移行運動量のある領域でいかに高エネルギーでも発散するとの昔の証明があります。組替え衝突の摂動論はなかなかやっかいです。

上の電子移行過程で A^+ , B^+ を構造のない粒子として扱い、原子A, Bのハミルトニアンと固有関数を $\hat{H}_A, \phi_A(\mathbf{r}_A), \hat{H}_B, \phi_B(\mathbf{r}_B)$, イオン-原子間相互作用と相対運動エネルギー演算子を $\hat{V}_{A^+-B}, \hat{T}_{A^+-B}, \hat{V}_{A-B^+}, \hat{T}_{A-B^+}$ とします。衝突前後で粒子対も相互作用も変わるので、全系のハミルトニアン \hat{H} の無摂動部と摂動への適切な別け方が

$$\hat{H} = [\hat{T}_{A^+-B} + \hat{H}_B] + \hat{V}_{A^+-B} = [\hat{T}_{A-B^+} + \hat{H}_A] + \hat{V}_{A-B^+}$$

と電子移行前後で異なります。移行前に適切な別け方では移行後には不適切、移行後用の別け方では移行前には向きません。また、 A^+ , B^+ , e^- の三つがバラバラという無摂動状態も可能で、別け方に応じ3種のボルン級数が作れます。

1次ボルン近似なら式(8.13)のような積分を

$$\text{移行前型: } (\phi_A(\mathbf{r}_A) e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} | \hat{V}_{A^+-B} | \phi_B(\mathbf{r}_B) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}})$$

$$\text{移行後型: } (\phi_A(\mathbf{r}_A) e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} | \hat{V}_{A-B^+} | \phi_B(\mathbf{r}_B) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}})$$

のどちらかの摂動により計算します。正確な ϕ_A , ϕ_B を使えば両者が等しいと証明できますが、どちらも無摂動系の矛盾を含み、不自然です。近似関数を使えば両者が食い違い(post-prior discrepancy), どちらが良いと一概に言えません。

問題を正確に解けばほとんど無視できる, また実際, 相対運動を古典近似する限り断面積に影響を与えないことが証明できる A^+-B^+ 間相互作用を1次ボルン近似に含めるジャクソン-シッフ (Jackson-Schiff, JS) 近似と取り去るオープンハイマー-ブリンクマン-クラマース (Oppenheimer-Brinkman-Kramers, OBK) 近似があります. 高エネルギーでも結果が悪い OBK 近似に対し, JS 近似は電子移行過程 $H^+ + H(1s) \rightarrow H(1s) + H^+$ で成功しました. しかし, 多価イオンでは JS 近似も悪く, その原因は電荷移行後のチャンネルの漸近的クーロン力を波動関数に正しく反映していないからとわかり, これを修正する種々の近似法が提案されたのです.²¹⁻²³⁾

水素型原子についての電子移行 $A^+ + B(nlm) \rightarrow A(n'l'm') + B^+$ の1次ボルン断面積は高エネルギーでの主要項が $E^{-6-l-l'}$ に比例します. 式 (8.19) の励起過程なら, 全散乱角に亘り積分すると主要項は光学的禁制遷移なら $\propto E^{-1}$, 許容遷移なら $\propto E^{-1} \ln E$ なので,⁸⁾ それに比べ, 電子移行過程の急速な減少の特殊性が分かります. さらに, 上で述べた3種のボルン級数のいずれも, 2次ボルン断面積はどんな l, l' でも $\propto E^{-5.5}$ という項を含みます. なんと, 高エネルギーになると2次項が1次項に打ち勝ってしまうのです!²¹⁾

その機構は古典的に解釈できます. 古典散乱でエネルギー保存則と運動量保存則を満たしながら電子が一方のイオンから他のイオンに乗り移るには, 最低2回の2体弾性散乱を経る必要があるというトーマス (Thomas) の議論です.^{21, 22)}

原子Bの電子(質量 m_e) がまず入射イオン A^+ (質量 M) に 60° 弾き飛ばされ, A^+ は実験室系で角度 $\theta = \sqrt{2}m_e/3M$ の反跳を受けます. 電子は続いて B^+ に -60° 散乱され, 入射 A^+ と同じ速度ベクトルで併走してそれに捕まります. クーロン散乱2回のエネルギー依存性がそれぞれ $\propto E^{-2}$, $\sim 60^\circ$ 散乱2回により A^+ に束縛されるための位相空間体積による因子が $\propto E^{-3/2}$ で, 全体で $E^{-11/2}$ の依存性になります. 高い n, l 状態についてはトーマスの古典的解釈が量子論的にも支

持されることが後に示されました.

先に述べた3種類のボルン級数のいずれも電子が A^+, B^+ に一度ずつ散乱される項を2次ボルン項に含みます. 実際, Aの角分布の $\theta = \sqrt{2}m_e/3M$ に古典2重散乱機構によると解釈されるいわゆるトーマスピークが MeV 領域の電子移行過程で理論的にも実験的にも確認されています.²¹⁾

第8章 文献

- 1) 江沢洋 [1], §12.
- 2) 高柳和夫 [3], §4-4.
- 3) 砂川重信 [2], §2.4.
- 4) B. H. Bransden and C. J. Joachain [4], §12.7.
- 5) L. D. Landau and E. M. Lifshitz [8], §126.
- 6) 砂川重信 [2], §2.2.
- 7) B. H. Bransden and C. J. Joachain [4], §12.4.
- 8) M. Inokuti, Rev. Mod. Phys. **43**, 297 (1971).
- 9) 高柳和夫 [3], §5-1.
- 10) 高柳和夫 [12], §4.1.
- 11) 高柳和夫 [3], §5-2.
- 12) 高柳和夫 [12], 付録 F.
- 13) E. N. Lassettre, A. Skerbele, and M. A. Dillon, J. Chem. Phys. **50**, 1829 (1969).
- 14) A. Skerbele and E. N. Lassettre, J. Chem. Phys. **58**, 2887 (1973).
- 15) I. Shimamura, Electron-Molecule Collisions, eds. I. Shimamura and K. Takayanagi (Plenum, N.Y., 1984), Chap. 2.
- 16) E. P. Wigner, Phys. Rev. **73**, 1002 (1948).
- 17) A. I. Baz', Sov. Phys. JETP **6**, 709 (1958).
- 18) L. D. Landau and E. M. Lifshitz [8], §147.
- 19) B. H. Bransden and C. J. Joachain [4], §12.3.
- 20) J. N. Bardsley and R. K. Nesbet, Phys. Rev. A **8**, 203 (1973).
- 21) B. H. Bransden and C. J. Joachain [4], §14.5.
- 22) 高柳和夫 [12], §7.2.
- 23) D. P. Dewangan and J. Eichler, Phys. Rep. **247**, 59 (1994).

9 複素エネルギー状態は実在するか — 共鳴過程を陰で操る黒幕

9.1 非物理的な複素エネルギー状態

複素数の物理量なんて、まさか実在するわけがないでしょう。量子論の初歩として、物理量の測定値は必ず実数で、それを表す演算子は必ずエルミートだと学びます(第2.2節)。しかし、共鳴状態は複素エネルギーをもつなどというとてもない話も、確かに耳にします。でも、そもそも物理の議論で複素数や無限大が出てきたら、なぜそんな変なものが現れるのか、その真意は何なのか、しっかり確認する必要があります。

先に打ち明けてしまえば、これは想像の世界です。「共鳴状態」(resonance state)と呼ばれる複素エネルギー \mathcal{E} の状態の波動関数 $\Psi(\mathcal{E})$ は遠方で際限なく増大してしまう、量子論で物理的に許されない「お話」なのです(第9.5節)。なぜそんなバカ話にうつつを抜かすのか。目的は、現実世界をしばし忘れて複素エネルギーの空想の世界に浸り、その虚部がゼロになった極限として実在の物理現象を見直すことによりその理解を深めることにあります。そんな見方をすると、非物理的、非現実的な共鳴状態 $\Psi(\mathcal{E})$ が特異な、しかし現実の実エネルギーの物理現象「共鳴過程」と密接に結びつくのです(第9.5節)。

この共鳴過程では断面積のエネルギー依存性に特徴的な鋭い構造が現れます。これは原子分子過程に限りません。1930年代から議論のある共鳴過程ですが、今や時宜を得た話題として諸論文誌、レビュー誌に特集号が見られます^{1,2)}。広範な分野で多様な議論や応用が進展していて、それをすべて追うのが非常に難しい現状です。

本章では別稿の解説³⁾とは少し異なる諸側面に光を当て、共鳴理論を基礎から解説します。なるべく本稿内で閉じるよう、別稿と一部重複します。 S 行列を無限大にする複素エネルギー状態と共鳴過程の関係につき多少ご存じでも、ここは本章の論理の筋道を追ってみてください。なお、非エルミート量子力学など、共鳴現象の議論に

適した近年発展の理論体系⁴⁾は扱わず、本章では伝統的な散乱理論に基いた考察を進めます。複素エネルギー状態を頻りに論じていると、それがあたかも実体であるかのように感じられてくるかも知れませんが、現実には観測されるエネルギーが実数であることは言うに及びません。

9.2 「共鳴状態」の定義いろいろ

「共鳴状態」 $\Psi(\mathcal{E})$ は非物理的な複素エネルギー状態と述べました。しかし、別の定義もあります。現実の過程は波動方程式 $\hat{H}\Psi(E)=E\Psi(E)$ を実エネルギー E で正確に解けばその解、つまりハミルトニアン \hat{H} の固有関数 Ψ に情報がすべて含まれているはずですが、共鳴過程も例外ではありません。共鳴過程を表すこの実エネルギー状態 $\Psi(E)$ も「共鳴状態」と呼ばれます。これはどんなに遠くでも有限な、物理的に妥当な波動関数で、何らかの「過程」を表すので当然、連続状態です。連続状態なのですが、狭いエネルギー領域内、狭い空間領域内でのみ振幅が大きい束縛状態まがいの波動関数であることが共鳴過程を表す $\Psi(E)$ の特徴で、それに比べ、遠方まで波打つすそ野部分の振幅が小さいのです。この共鳴状態を準束縛状態(quasi-bound state)とも呼びます。

振幅の小さなすそ野部分を何らかの手法で切り捨てて束縛状態型にした近似関数 Φ も「共鳴状態」と呼び、準束縛状態と呼ばれることもままあります。 $\Psi(E)$ や $\Psi(\mathcal{E})$ と違い、 Φ はシュレーディンガー方程式を正確には満たしません。また、一義的に定義することもできません。2電子励起自動電離状態はこの種の「共鳴状態」です。 $\Psi(E)$ が表す現実の断面積に異常なエネルギー依存性を示させる元凶がこの Φ や $\Psi(\mathcal{E})$ なのです。

9.3 摂動が作る準束縛状態

摂動の概念は共鳴状態の物理的理解に役立つので、この節で少し考えてみましょう。束縛状態型共鳴状態 Φ を固有関数とする近似ハミルトニアン \hat{H}_Q を考えることもできます。そのとき、正しいハミルトニアン \hat{H} はこの近似ハミルトニ

アン \hat{H}_Q に摂動 $\hat{H}' = \hat{H} - \hat{H}_Q$ が加わった形を取ることになります。⁵⁾ つまり、

$$\hat{H}_Q \Phi = E_Q \Phi, \quad (9.1)$$

$$\hat{H} \Psi(E) = (\hat{H}_Q + \hat{H}') \Psi(E) = E \Psi(E) \quad (9.2)$$

と書き、 \hat{H}' を弱い摂動と考え、 $\Psi(E)$ の大振幅部分では $\Phi \simeq \Psi$ という物理条件を課します。

決まった実エネルギー E_Q をもつ物理的「共鳴状態」 Φ は束縛状態型なので遠方への浸み出しはなく、壊れることはありません。一方、現実の準束縛的連続状態である「共鳴状態」 $\Psi(E)$ は一定の振幅で遠方まで到達し、これはいずれ壊れることを意味します。摂動 \hat{H}' が壊すのです。

例えば、ヘリウム原子のどちらの電子にも $1s$ 軌道を許さない演算子 \hat{Q} をハミルトニアンに施した $\hat{H}_Q = \hat{Q} \hat{H} \hat{Q}$ につき固有値方程式(9.1)を解くと、多数の2電子励起自動電離状態 Φ のエネルギー E_Q が得られます(付録9A)。シュレーディンガー方程式(9.2)を解けば、 \hat{H}' の効果で自動電離状態 Φ にチャンネル $\text{He}^+(1s) + e^-$ などが混ざり、電離が起こります(第9.11節)。

詳しくは述べませんが、有名なファーン(Fano)の共鳴論文⁶⁾でも、規格化された適当な束縛状態型の Φ と共鳴を含まない適当な近似連続状態をこの方式で結合させて共鳴公式を導いていると解釈できます。波動関数から状態 Φ を抽出する演算子 \hat{Q} により $\hat{H}_Q = \hat{Q} \hat{H} \hat{Q}$ と書けば、式(9.1)は文献6)の近似共鳴準位を表す期待値の式 $(\Phi | \hat{H} | \Phi) = E_Q$ と同等なことが示せるからです(付録9A)。

狭い空間領域内で Ψ の振幅が大きいのは、時間依存描像ではこの領域に滞在する時間が長く、中間状態として長寿命状態ができることを表し、 Φ はこの中間状態を近似すると言えます。ポテンシャル散乱なら入射粒子が場に捕えられた状態、2体衝突なら衝突粒子同士が結合した衝突複合体がそれです。これは衝突終了までの時間(衝突時間)が長い、衝突による時間の遅れ(time delay) $\Delta t(E)$ が大きいということです(第9.9節)。中間状態が長寿命なら実質的相互作用が強くなり、その過程の断面積 $\sigma(E)$ に強い影響を与えます。長

い有限寿命をもつ準束縛状態が形成されてからゆっくり壊れるのが共鳴過程の本質です。

準束縛状態のエネルギー準位 E_r の測定にその寿命 τ 以上の長い時間をかけられないので、エネルギーと時間の不確定性関係により、 E_r には

$$\Gamma = \hbar/\tau \quad (9.3)$$

ほどの原理的あいまいさが避けられません(第7.8節)。実際、この状態が当該過程に与える影響、共鳴現象は $E = E_r$ (共鳴エネルギーと呼びます)の周り、幅 Γ (共鳴幅と呼びます)ほどに亘って起こります(第9.5節以降)。

\hat{H}_Q の固有状態 Φ は束縛状態なので、 \hat{H}_Q が決まれば固有値 E_Q は明確に決まります。摂動 \hat{H}' が共鳴中心を E_Q から E_r に $\Delta E = E_r - E_Q$ だけずらすとともに、共鳴幅 Γ を生みます。

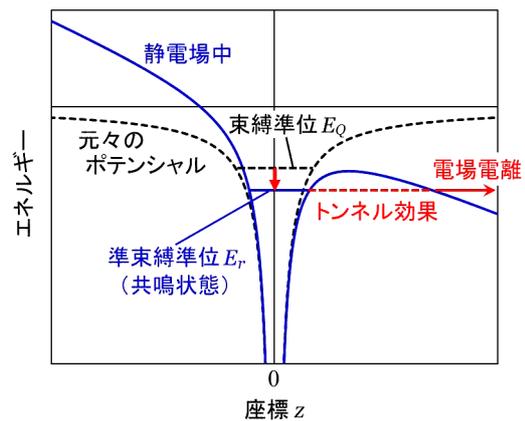


図 24. 静電場により束縛状態準位 E_Q が準束縛状態準位 E_r になる様子。シュタルク効果で準位がずれ、トンネル効果で自動電離して準位幅が生まれる。

散乱過程とは違う例としてシュタルク効果を考えます。ハミルトニアン \hat{H}_Q 、波動関数 Φ 、束縛状態準位 E_Q で表される孤立原子に静電場をかけます(図24)。その摂動 \hat{H}' により、エネルギー準位がわずかにずれ、 $E_r = E_Q + \Delta E$ になります。極端に強い電場でない限り、このずれ ΔE は摂動論で良く近似できます。しかし、いかに弱い電場でも図24の z 軸正方向の十分遠方で全ポテンシャルが E_r より下がり、トンネル効果で波動関数はポテンシャル障壁の外へ浸み出し、束縛状態は

準束縛状態に変わります。つまり、電場により幅 Γ が生まれ、寿命が有限になります。準束縛状態準位は固有値問題で決まるわけではなく、固有値に対するふつうの摂動論は使えないはずで、それにも拘わらず、測定されたシュタルク準位が摂動近似で精度良く再現できるという物理的事実から、準束縛状態準位の摂動論の妥当性を論ずる数学分野が発展しました。

9.4 複素エネルギーのいろいろな起源

有限寿命で壊れる系は第3.6節でも議論をしました。陽電子消滅のように流れが保存されずに減少する現象を虚数ポテンシャル iV_{Im} ($V_{\text{Im}} < 0$) で表せるという話でした。例えば、電子-陽電子系束縛状態、ポジトロニウムの波動関数はクーロン相互作用だけ考えれば水素型ハミルトニアン \hat{H}_Q の固有関数 $\Phi = \psi_{nl}$ で、固有エネルギー E_Q は水素型 $-6.8 \text{ eV}/n^2$ です。しかし、対消滅を起こすポテンシャル $\hat{H}' = i\hat{V}_{\text{Im}}$ を加えたハミルトニアン \hat{H} はもはやエルミートではなく、エネルギー固有値は複素数になります。この対消滅ポテンシャルはクーロン相互作用に比べて非常に弱いので、複素エネルギーの虚部(仮に $-\Gamma/2$ としておきましょう)は1次摂動論により

$$-\Gamma/2 = (\psi_{nl} | \hat{V}_{\text{Im}} | \psi_{nl}) \quad (9.4)$$

と書けます。時間依存波動関数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ は時間非依存波動関数 ψ_{nl} に因子 $e^{-iEt/\hbar}$ をかけて得られ(第3.3節)、これが表す確率密度 $P(\mathbf{r}, t)$ は

$$\begin{aligned} P(\mathbf{r}, t) &= |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \\ &= |\psi_{nl}|^2 |\exp\{-i(E_Q - i\Gamma/2)t/\hbar\}|^2 \\ &= |\psi_{nl}|^2 \exp(-\Gamma t/\hbar) \end{aligned} \quad (9.5)$$

と時間定数 $\tau = \hbar/\Gamma$ で $e^{-t/\tau}$ のように減衰し、準束縛状態の寿命 τ と共鳴幅 Γ の関係(9.3)と整合します。これは複素エネルギーの虚部を $-\Gamma/2$ と書けばその Γ が共鳴幅の意味をもつことを示します。減衰レートは $\tau^{-1} = \Gamma/\hbar$ と書けます。

以上、有限寿命状態の減衰を表すため導入した虚数ポテンシャルによりハミルトニアンが非エルミートになり複素エネルギーを生じました。

一方、第9.1節で触れ、第9.5節で詳しく扱う複素エネルギーは素性が違います。現実の実数ポテンシャルによるエルミートなハミルトニアン \hat{H} の波動方程式(9.2)でエネルギー E を人為的に複素数と仮定します。これに特定の条件を課すと共鳴現象を表せるのです。どちらの複素エネルギーもその虚部が有限寿命 \hbar/Γ での指数関数的減衰を生むという物理的意味をもちます(第9.5節)。

球対称場での動径波動関数は実数エネルギー E 、実数波数 k では一般に第3.2節、式(3.2)、または次節、式(9.6)のように内向き波と外向き波の線形結合でその漸近形が表されますが、外向き波だけしかない——これをガモフ(Gamow)状態、またはシーガート(Siegert)状態と呼びます——という漸近境界条件のもとに、 k 、 E を複素数に一般化して波動方程式を固有値問題として解くと、共鳴状態(第9.5節)、束縛状態(第9.10節)、仮想状態(第9.10節)、連続状態に相当する固有状態が定義されます。それらから完全系をなす固有関数群を選ぶ条件等、種々の数学的研究があり、それに基づく応用計算も行われています。⁴⁾ なお、外向き波だけとは言っても、例えば k が正の純虚数なら指数関数的に減少する束縛状態型の波動関数になるなど、複素 k 平面上では実際にはいろいろな漸近形が含まれることになります。

複素エネルギーはまた別の理論からも出てきます。現実のハミルトニアンで座標変数に因子 $e^{i\alpha}$ をかけて複素数に変えてしまう人為的操作で、複素座標法とか、偏角を α だけ回転するので複素座標回転法などと呼ばれる手法です。⁷⁾ その結果、非エルミートになったハミルトニアンにつき束縛状態型固有関数という条件で決めた固有値はパラメータ α に依る複素数になり、その中から理論的に裏付けされた手続きで「共鳴状態を表す複素エネルギー」を選び出します。空間積分が有限になる束縛状態型関数だけを扱えば済むので計算に大変便利です。ただ、得られるのは複素エネルギーそのものだけで、断面積などの観測量は別の特別な工夫をしなければ出せず、現実の過程に共鳴がどう影響するか知るのには困難です。

9.5 複素エネルギー面と共鳴公式

では、ここからいよいよ共鳴理論を展開しましょう。時間非依存中心力ポテンシャルによる質量 m 、波数 k の粒子の散乱で部分波 l の時間依存動径波動関数は有限の大きな r で

$$u(r, t; k) \sim e^{-iEt/\hbar} \sin[kr - l\pi/2 + \delta(k)] \\ \propto e^{-iEt/\hbar} [e^{-i(kr - l\pi/2)} - S(k)e^{i(kr - l\pi/2)}] \quad (9.6)$$

と書けます(第3.2節)。 S 行列 $S(k)$ 、位相のずれ $\delta(k)$ は l に依りますが、添え字 l は省略します。

流れの保存のためには外向き波の振幅の絶対値 $|S(k)|$ は内向き波の振幅の絶対値 1 に等しくなければなりません。 $S(k)$ は位相のずれ $\delta(k)$ で $e^{2i\delta(k)}$ と書け、現実の実数波数での散乱では事実、 $|S(k)|=1$ です(第3.2節)。でも、もしも波数 k 、エネルギー $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ を人為的に複素数にして波動方程式を解けば、そんな非物理的状況では流れが保存されず、 $S(k)$ はどんな値でも取れます。

ある複素波数 $k = k_1 - ik_2$ ($k_1 > k_2 > 0$ 、第4象限の半分内)で $S(k)$ が無限大になる(その k に極をもつ)とします。複素エネルギー平面上でのその極の位置を $E = \mathcal{E} \equiv E_r - i\Gamma/2$ と書くと、

$$E_r = \frac{\hbar^2}{2m}(k_1^2 - k_2^2) > 0, \quad \Gamma = \frac{2\hbar^2}{m}k_1 k_2 > 0 \quad (9.7)$$

と分かります。極では式(9.6)で巨大係数がかかる外向き波に比べ内向き波は無視でき、^{8,9)} 波動関数 $u(r, t; k)$ は大きな r で $e^{-iEt/\hbar} e^{ikr}$ に比例します。 $|u(r, t; k)|^2$ は式(9.5)と同じく時間定数 $\tau = \hbar/\Gamma$ で指数関数的に減衰しますが、空間的には $u(r, t; k) \propto e^{ik_1 r} e^{k_2 r}$ と遠方へ逃げ続けて共鳴状態の様相を呈し、規格化不能です。なお、証明は省きますが、 $k_1 + ik_2$ (第1象限)には外向き波だけ生ずる極がありません。⁹⁾

極が複素エネルギー平面の実軸近くにあれば (Γ が小さければ)、 $S(E)$ のこの特異な状況が極に近い実数エネルギーでの現象に反映されると予期されます。極が実軸に近いなら、極の近くで使える $S(E)$ の近似式はその付近の実数エネルギーでも使えるはずです。そのためには、その近似式は $E = \mathcal{E}$ で無限大になり、実数の E では

流れの保存則を満たすべく絶対値が1でなければなりません。この両条件とも満たすブライト-ウィグナー (Breit-Wigner) の共鳴公式

$$S(E) = e^{2i\delta_b} \frac{E - \mathcal{E}^*}{E - \mathcal{E}} = e^{2i\delta_b} \left(1 - \frac{i\Gamma}{E - \mathcal{E}} \right) \quad (9.8)$$

があります(*は複素共役)。^{9,10)} δ_b はエネルギー依存性の弱い勝手な位相です。式(9.8)は一つの極だけを考えているのでブライト-ウィグナーの1準位公式とも呼びます。これがなぜ共鳴なのか、もう少し議論を進めましょう。

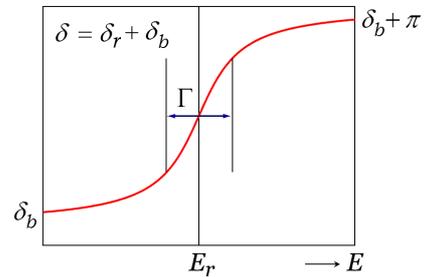


図25. 位相のずれのブライト-ウィグナー1準位公式(9.10)。

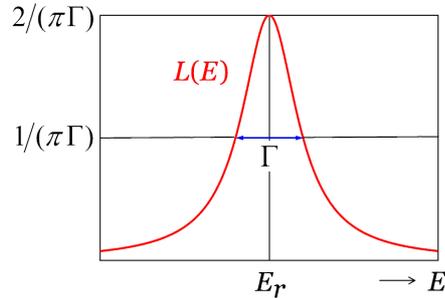


図26. 共鳴過程に関わる半幅 Γ の規格化されたローレンツ分布関数(9.13)。 E の期待値は定まらない。図25とは式(9.12)の関係がある。

実数の E につき $E - \mathcal{E}^* = (E - E_r) - i\Gamma/2 = ce^{i\delta_r}$ と極形式で表すと、その実部と虚部の比から

$$\epsilon \equiv (E - E_r)/(\Gamma/2) = -\cot \delta_r(E) \quad (9.9)$$

が導けます。また、 $E - \mathcal{E} = (E - \mathcal{E}^*)^* = ce^{-i\delta_r}$ と書けるので、式(9.8)から $S = e^{2i(\delta_b + \delta_r)}$ が得られ、これが $e^{2i\delta}$ に等しいことから、 π ラジアン of 整数倍の不定性を除き

$$\delta(E) = \delta_r(E) + \delta_b = -\cot^{-1} \epsilon + \delta_b \quad (9.10)$$

と書けます。これが位相のずれのブライト-ウィグナー公式です。^{9,10)} 以下、 δ_b に弱い E 依存性

があっても何ら困りませんが，式を簡潔にするため本章では一貫して δ_b を定数として扱います。

換算エネルギー ϵ が $\epsilon \ll -1$ から $\epsilon \gg 1$ まで増えると，つまり E が E_r 周辺で Γ の何倍かのエネルギー範囲を動くと，式(9.10)の $\delta(E)$ はバックグラウンドの値 δ_b から π ラジアンほど急増します(図25)．断面積の共鳴構造は次節に示します。

微分公式

$$d(-\cot^{-1}\epsilon)/d\epsilon = (\epsilon^2 + 1)^{-1} \quad (9.11)$$

により， $\delta(E)$ の増加率は

$$d\delta(E)/dE = d\delta_r(E)/dE = \pi L(E) \quad (9.12)$$

と半値幅 Γ のローレンツ分布関数

$$L(E) = \frac{(\Gamma/2)^{-1}}{\pi(\epsilon^2 + 1)} = \frac{\pi^{-1}(\Gamma/2)}{(E - E_r)^2 + (\Gamma/2)^2} \quad (9.13)$$

に比例し，共鳴中心 $E = E_r$ で最大，その左右で対称になります(図26)．式(9.11)を逆に積分した

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (\epsilon^2 + 1)^{-1} d\epsilon = [-\cot^{-1}\epsilon]_{-\infty}^{+\infty} = \pi$$

を使い，式(9.13)を広い E の範囲で積分すると

$$\int_{-\infty}^{+\infty} L(E) dE = 1 \quad (9.14)$$

となります． $L(E)$ は規格化されているのです。

ローレンツ分布は統計学ではコーシー分布と呼ばれる，変数 E の期待値自体，定まらない奇妙な確率分布です．これは無限極限の取り方に注意すべき好例なので，共鳴の主題からは余談になります，少し事情を調べましょう．例として $\Gamma = 2$ とし， $x \equiv E - E_r$ と置いて x の期待値を計算してみます．まず有限区間での定積分を求め，

$$\begin{aligned} \int_{-x_1}^{+x_2} xL(x)dx &= \int_{-x_1}^{+x_2} \frac{xdx}{\pi(x^2+1)} = \int_{-x_1}^{+x_2} \frac{d(x^2)}{2\pi(x^2+1)} \\ &= \frac{1}{2\pi} \left[\log(x^2+1) \right]_{-x_1}^{+x_2} = \frac{1}{2\pi} \log \left(\frac{x_2^2+1}{x_1^2+1} \right) \\ &\xrightarrow{x_1, x_2 \rightarrow \infty} \pi^{-1} \log(x_2/x_1) \end{aligned} \quad (9.15)$$

としてみると，比 x_2/x_1 を勝手な定数 C に固定して無限極限を取れば期待値は $\pi^{-1} \log C$ と極限の取り方でどうにでもなります． x_1, x_2 を独立に大きくすれば，もちろん極限値は決まりません。

以上，共鳴構造が一つだけ，平坦なバックグラウンドに重なる最も簡単な場合を扱いました．もしも，二つ，またはそれ以上の共鳴構造が重なって現れるならば， S 行列の1準位公式(9.8)は

$$S(E) = e^{2i\delta_b} \prod_n \left(1 - \frac{i\Gamma_n}{E - \mathcal{E}_n} \right) \quad (9.16)$$

と拡張されます.⁵⁾ここで，重なり合う各共鳴に番号 n を付け，それぞれについての共鳴パラメータ Γ, \mathcal{E} に添え字 n を付けました．この多準位公式も実エネルギーでは絶対値 $|S(E)|$ は1で，また $E = \mathcal{E}_n$ に極をもつことが明らかです。

9.6 高校数学で導くファーンノの共鳴公式

球対称場による散乱の積分断面積は

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (9.17)$$

と表せます.¹⁰⁻¹²⁾共鳴過程は狭いエネルギー範囲で起こるので，非常にゼロに近いエネルギーを除き，共鳴範囲内で部分波断面積 $\sigma_l(E)$ も積 $E\sigma_l(E)$ もほとんど $\sin^2 \delta_l(E)$ で形が決まります。

再び1準位共鳴に話を戻しましょう．もしも $\delta_b = 0$ ならば，式(9.9)，(9.13)により

$$\begin{aligned} E\sigma_l(E) &\propto \sin^2 \delta_r = (\cot^2 \delta_r + 1)^{-1} \\ &= (\epsilon^2 + 1)^{-1} \propto L(E) \end{aligned}$$

で，断面積はローレンツ型の E 依存性を示し， Γ は共鳴幅の名にふさわしく断面積に共鳴状態の影響が及ぶエネルギー幅を代表します(図26)．

一般の $\delta_b \neq 0$ の場合， $1 = \sin^2 x + \cos^2 x$ を使えば

$$\begin{aligned} E\sigma_l(E) &\propto \sin^2 \delta(E) = \sin^2(\delta_r + \delta_b) \\ &= \frac{(\sin \delta_r \cos \delta_b + \cos \delta_r \sin \delta_b)^2}{(\sin^2 \delta_r + \cos^2 \delta_r)(\sin^2 \delta_b + \cos^2 \delta_b)} \\ &= \frac{(\epsilon + q)^2}{(1 + q^2)(\epsilon^2 + 1)} = \frac{(1 + \epsilon/q)^2}{(1 + q^{-2})(\epsilon^2 + 1)} \end{aligned} \quad (9.18)$$

を得ます.^{3,5)}ここで式(9.9)に似た形の量

$$q = -\cot \delta_b \quad (9.19)$$

を定義し，式(9.18)の最下行には q が小さいとき，大きいときに便利な等価な2式を書きました。

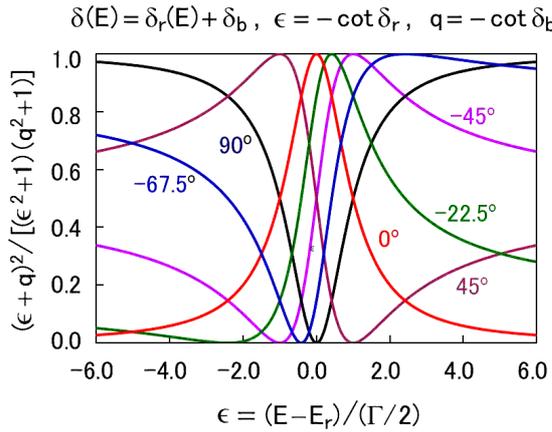


図 27. バックグラウンドの位相のずれ δ_b の値に依り様々な形を取る共鳴断面積のエネルギー依存性 (9.18).

いくつかの δ_b の値につき式 (9.18) を図 27 に示します. 断面積の形が δ_b , したがって q に依り様々な変わるので q を形状パラメータと呼びます. 式 (9.18) はファーン⁶⁾ がより一般の過程につき導いた通称ファーン公式 (Fano profile; これを Fano's profile と言うと「ファーンの横顔」になってしまいます) と規格化因子 $1+q^2$ を除き同じです. この因子は一見, 本質的でなさそうですが, 図示の上では大切なことを別稿で指摘しました.³⁾

式 (9.18) の最終結果は多方面で重宝されていますが, 上の導出から分かるように, 中心力場による散乱では実は $\sin^2 \delta$ の変数 δ を勝手な 2 部分に分割し, それぞれの \cot で書き換えただけの単なる三角関数の数式変換で出るので. これにブライト-ウィグナー式 (9.9) の $-\cot \delta_r$ の E 依存性を導入すれば共鳴形状の意味が備わるのです.

先に導いた $\delta_b = 0$ の断面積がローレンツ型を示す事実が図 27 に見て取れます.¹³⁾ 規格化因子 $1+q^2$ を含まないファーン流の図ではこの最も典型的な左右対称ピークが無限に高くなり, 描けません. また, ファーン流ではピーク値が q の値に依ってしまうので, 一見, 断面積の大きさが q に支配されるかのように見えてしまいます.

図 27 で $\delta_b = \pi/2$ ならローレンツ型ピークを逆さにしたディップ (谷) になり, δ_b が 0 と $\pi/2$ の間, $\pi/2$ と π の間 ($-\pi/2$ と 0 の間でも同じ) なら大きさの異なるピークとディップが交互に現れます.

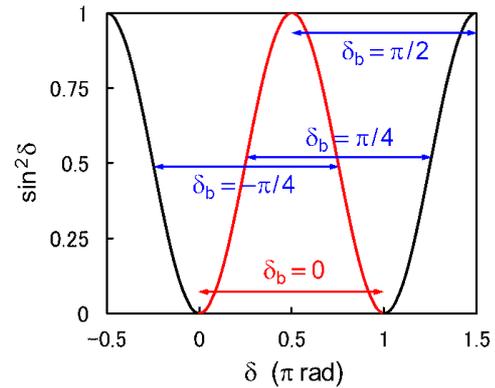


図 28. 共鳴断面積が δ_b によりいろいろな形を取る理由. $\delta(E)$ が δ_b から $\delta_b + \pi$ まで増えるとき, 断面積に比例する $\sin^2 \delta(E)$ が, δ_b に応じて図の曲線の異なる一部を切り取るため.

様々な形を取る「数式上の理由」は簡単です.^{3, 10)} $\delta(E)$ が δ_b から $\delta_b + \pi$ まで急増すると, 断面積に比例する $\sin^2 \delta(E)$ は $\sin^2 \delta_b$ から始まり 1 周期を経て元に戻ります (図 28). $\delta_b = 0$ で $\sin^2 0 = 0$ から始まれば途中で最大値 1 を経てゼロに戻るピーク, $\delta_b = \pi/2$ で $\sin^2 \pi/2 = 1$ から始まれば途中で最小値ゼロを経て 1 に戻るディップ, 半端な値から始まれば途中で最大値を取って後に最小値を取るか, あるいは最小値の後に最大値を取ってから元に戻り, ピークとディップが隣り合せて現れます.

以上, 共鳴散乱を起こす部分波の積分断面積 $\sigma_l(E)$ を論じました. ほかの部分波の積分断面積はエネルギー依存性の弱いバックグラウンドとしてこれに加算されます. 実際の実験では, 例えば電子ビームと原子ビームを交差させてその間の衝突断面積を測るとき, しばしば特定の散乱角 θ で微分断面積 $q(E; \theta)$ のエネルギー依存性に現れる共鳴構造を調べます. もしもほとんど部分波 l だけで共鳴微分断面積が決まっているなら, 部分波散乱振幅がルジャンドルの多項式 $P_l(x)$ で $f_l(E)P_l(\cos \theta)$ と書けることから, 微分断面積は $q(E; \theta) \simeq |f_l(E)|^2 P_l^2(\cos \theta)$ と角度部分が分離でき, どの散乱角 θ で測っても, ここまで議論してきた $\sigma_l(E)$ と同じエネルギー依存性, 同じ共鳴構造 ($\propto |f_l(E)|^2$) を示すことが分かります.

別の部分波, 例えば l' が無視できなければ, $q(E; \theta) \simeq |f_l(E)P_l(\cos \theta) + f_{l'}(E)P_{l'}(\cos \theta)|^2$ と

なり、 θ に依り異なる混ざり方で部分波 l との干渉が起こり、共鳴構造に θ 依存性が現れますし、散乱角分布も典型的な l 波型からずれてきます。

二つ以上の共鳴が重なる多準位共鳴では、断面積の形は多くのパラメータの組み合わせにより千差万別、とても複雑で、いくつかのパターンに別けて図示することもなかなか叶いません。

9.7 共鳴散乱と直接散乱は干渉するか？

断面積が様々な形を取る「物理的理由」は、共鳴状態を中間状態として経るために遅れて出てくる共鳴波と中間状態を経ない直接散乱波との干渉の仕方が δ_b に強く依るからです。…という、しばしば聞くこのもっともらしい説明、理論的な裏付けが必要です。散乱の位相のずれ(9.10)は共鳴散乱と直接散乱の位相のずれの重ね合せになっています。つまり、動径波動関数の内向き波と外向き波の線形結合の係数である S 行列には、共鳴散乱と直接散乱の効果が $S = e^{2i\delta_r} e^{2i\delta_b}$ と積の形で現れます。共鳴散乱と直接散乱の「波の重ね合せ」なんかになっていないじゃないですか！

そこで、断面積にもっと直接関わる散乱振幅に比例する遷移行列 $T = S - 1$ を調べます。 T の定義には文献により定数倍の違いがありますが、いずれにせよ、 T の本質は散乱振幅で、部分波断面積は $|T|^2$ に比例します。直接散乱がないとしたときの共鳴遷移行列を $T_r = e^{2i\delta_r} - 1$ 、直接散乱だけのときを $T_b = e^{2i\delta_b} - 1$ とすると、

$$\begin{aligned} T &= e^{2i(\delta_r + \delta_b)} - e^{2i\delta_b} + e^{2i\delta_b} - 1 \\ &= e^{2i\delta_b} T_r + T_b, \end{aligned} \quad (9.20)$$

したがって、 $e^{2i\delta_b} T_b^* = -T_b$ に注意すると、

$$E\sigma_l(E) \propto |T|^2 = |T_r|^2 + |T_b|^2 - 2\text{Re}[T_r T_b] \quad (9.21)$$

が得られます。 Re は実部を取る記号です。最右辺の最後の項が正に共鳴散乱と直接散乱の振幅の干渉効果を如実に表しています。本節冒頭で述べた「物理的理由」が妥当だということがこの議論によって証明されます。

9.8 状態数分布とエネルギーの不確定性

非物理的ではありながら、複素エネルギー共鳴状態 $\Psi(\mathcal{E})$ ($\mathcal{E} = E_r - i\Gamma/2$)が一つあると、 Γ ほどの実エネルギー幅に亘り連続的に現実の断面積が強い影響を受けることが分かりました。では、実エネルギー状態 $\Psi(E)$ の状態分布にはどんな影響があるのでしょうか。 $\Psi(E)$ は連続状態ですから単位エネルギー当りの状態数密度 $dn(E)/dE$ を調べてみましょう。

再び動径波動関数を扱います。状態数を数えやすいように連続状態を半径 $r = R_0$ の大きな球に閉じ込めて離散化し、その n 番目と $n-1$ 番目のエネルギー準位差を $\Delta E = E_n - E_{n-1}$ 、それに対応する波数差を $\Delta k = k_n - k_{n-1}$ 、このエネルギー2点での位相のずれの差を $\Delta\delta = \delta(E_n) - \delta(E_{n-1})$ とします。球の壁で波動関数がゼロになる、あるいはその位相が π の整数倍になるという条件から、 n が1増えるごとに $k_n R_0 - l\pi/2 + \delta(E_n)$ が π だけ増えることが分かります。したがって、単位エネルギー当りの状態数密度は

$$[(\Delta k)R_0 + \Delta\delta]/(\pi\Delta E)$$

になります。第1項はポテンシャル場がないときの状態数密度で、第2項が散乱効果により生じた項です。この第2項を $\rho(E)$ と書き、 $R_0 \rightarrow \infty$ ($\Delta E \rightarrow 0$)の極限を取れば

$$\rho(E) = \pi^{-1} d\delta/dE \quad (9.22)$$

となります。共鳴散乱の場合には式(9.12)から

$$\rho(E) = L(E) \quad (9.23)$$

が得られます。状態数密度も中心 E_r 、半値幅 Γ の「規格化された」ローレンツ分布を示します。

これはなかなか興味深い結果です。複素エネルギー $\mathcal{E} = E_r - i\Gamma/2$ に S 行列が極を一つもつとき、つまり、複素エネルギー \mathcal{E} をもつ非物理的共鳴状態 $\Psi(\mathcal{E})$ が一つあるとき、実在の実エネルギー共鳴状態 $\Psi(E)$ は、寄せ集めれば実質的に正に束縛状態一つに相当する連続状態をエネルギー幅 Γ のローレンツ型に分布させるのです。つまり、実

軸上には Γ ほどの原理的なあいまいさをもつ「一つの」共鳴エネルギー準位，準束縛準位が形成されることを状態数分布が示しているのです。

一定の対称性の束縛準位が一つずつ上るとその波動関数の節は一つずつ増えます。一方，一つの準束縛状態のエネルギー幅より下での位相のずれに比べ，上ではほぼ π ラジアン急増しているわけですが，これは波動関数の節がほぼ1個増えていることを意味するのですから，束縛状態の事情に良く似ています。

9.9 共鳴状態の生成・崩壊と時間遅れ

第7.3節の最後で，ある波数範囲に亘り時間依存平面波を重ね合せて作った波束につき，停留位相条件を使ってその群速度を調べました。その議論を平面波の代わりに式(9.6)の動径波動関数 $u(r, t; k)$ に当てはめてみましょう。

内向き波の位相 $\eta_{\text{in}} = -Et/\hbar - (kr - l\pi/2)$ に停留位相条件 $d\eta_{\text{in}}/dk = 0$ を課すと動径波束は

$$r = -[dE/d(\hbar k)]t = -(\hbar k/m)t \quad (9.24)$$

と負の時刻に一定群速度 $\hbar k/m$ でポテンシャル領域に向かって入ってきます。一方，外向き波には係数 $S = e^{2i\delta}$ がかかっているので停留位相条件は $d\eta_{\text{out}}/dk = 0$ ， $\eta_{\text{out}} = -Et/\hbar + kr - l\pi/2 + 2\delta$ となり，波束は

$$\begin{aligned} r &= [dE/d(\hbar k)]t - 2d\delta/dk \\ &= (\hbar k/m)[t - 2\hbar(d\delta/dE)] \end{aligned} \quad (9.25)$$

と正の時刻に内向き波と同じ一定群速度 $\hbar k/m$ で放射状に漸近領域へ出て行きます。ただし，エネルギー微分が正の位相のずれを生じる散乱が起これば

$$\Delta t(E) = 2\hbar(d\delta/dE) \quad (9.26)$$

だけ時間が遅れて出て行くことを式(9.25)は表しています。^{5,14)} 波束はポテンシャル領域を時間 Δt の間，ウロウロしてからやっと出てくるのです。 $\Delta t(E) < 0$ ならせつかにそれだけ先んじて出て行きます。

共鳴散乱ではブライト-ウィグナー式(9.10)に従いすでに求めてある式(9.12)の $d\delta_r/dE$ により

$$\Delta t(E) = \hbar L(E) \quad (9.27)$$

とローレンツ関数が得られます。共鳴中心 E_r で最も長い時間遅れ $4\hbar/\Gamma = 4\tau$ を起こし，そこから両側に $\Gamma/2$ だけずれたエネルギーで時間遅れは半減します(図26)。

この時間遅れはエネルギー E の関数ですが，これを規格化された状態数密度分布 $\rho(E)$ の重みを付けて平均すると

$$\begin{aligned} \int \Delta t(E)\rho(E)dE &= \hbar \int L^2(E)dE \\ &= (4\tau/\pi) \int_{-\infty}^{+\infty} (1+\epsilon^2)^{-2} d\epsilon = 2\tau \end{aligned} \quad (9.28)$$

と計算されます。一つの共鳴全体としての平均的な時間遅れは $2\hbar/\Gamma$ なのです。その半分は共鳴状態の生成に，残りの半分が崩壊にかかる時間と理解できます。

ポテンシャル散乱の共鳴は入射粒子がポテンシャル領域に時間 2τ ほど捕獲されることを表します。2体衝突の共鳴なら相対運動の波束が至近距離に時間 2τ ほど滞在し，2体の複合体が 2τ ほどの時間できていることを表します。

9.10 共鳴状態を作らない共鳴過程？

第9.5節で議論した S 行列の極がもしも複素 k 平面の正か負の虚軸上， $k = i\kappa$ にあれば，大きな r で波動関数は $\propto e^{-\kappa r} e^{-iE_b t/\hbar}$ ，エネルギーは $E_b = -\hbar^2 \kappa^2/2m$ となります。 $\kappa > 0$ なら負エネルギーで漸近的に減少する波動関数，束縛状態を与えます。 $\kappa < 0$ なら負エネルギーで漸近的に増大する非物理的波動関数，仮想状態(virtual state)を与えます(第0.2節)。反束縛状態(antibound state)と呼ぶ文献もあります。共鳴状態のことをvirtual stateと呼ぶ古い文献もあって紛らわしく，前後の脈絡から意味を掴む必要があります。

束縛状態にせよ，仮想状態にせよ，それがごく小さな $|E_b|$ をもつ s 状態ならば，つまりごく小さな純虚数波数 $i\kappa$ に s 状態 S 行列の極があれば，

その影響で複素 k 平面上のすぐ近く、ゼロ波数極限で断面積が巨大な値 $4\pi/k^2$ を取ります(第0.2節).¹⁵⁾ これをしばしばゼロエネルギー共鳴、または仮想状態共鳴などと呼びますが、^{8,15)} 長寿命の共鳴状態を中間状態として経る共鳴過程とは物理的機構も違いますし、断面積の双曲線型エネルギー依存性(0.10)も共鳴公式と全く違うことはすでに第0.2節で注意した通りです。共鳴極 $k = k_1 - ik_2$ ($k_1 > k_2 > 0$; 第9.5節)で極限 $k_1 \rightarrow 0$ を取れば $k = -ik_2$ だから仮想状態は共鳴状態の極端な例だ、などと短絡してはいけません。条件 $k_1 > k_2$ を破るし、この極限では $E_r < 0$, $\Gamma = 0$ になり、負エネルギーに位置する幅ゼロの共鳴の影響が $E \geq 0$ へ及ぶなどあり得ません。「ゼロエネルギー共鳴」はここまで述べてきた類の共鳴散乱を全く含まない、非共鳴・直接散乱断面積が巨大になる現象なのです(第0.2節)。

実は、共鳴状態を経る過程でも、遠距離型相互作用による強い直接散乱のためにその効果が打ち消され、正味の時間遅れ(9.26)が逆に負になってしまう例もあります。⁵⁾ このとき、共鳴状態が作られるにも拘わらず、位相のずれはエネルギーの増加とともに π ラジアン急増するどころか、かえって減少してしまいます。

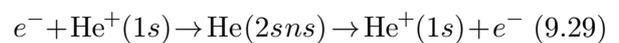
位相のずれ $\delta(E)$ が正の傾きで $\pi/2$ の奇数倍を通過するだけで共鳴と呼ぶ文献も昔はよくありました。そこで断面積が極大値を取りますし、非常に狭い幅 Γ の共鳴が実際にあれば、 $\delta(E)$ が $\pi/2$ の奇数倍になるエネルギーと E_r とはわずかに Γ 程度の違いしかありません。でも、たまたま $\pi/2$ を通り過ぎただけで $d\delta/dE$ が小さいときは時間遅れが少なく、準安定な共鳴状態が中間状態として作られたとは言えません。言葉遣いの定義なぞ人それぞれ勝手にいいじゃないかと言われるかも知れませんが、その物理的内容が全く違うことは肝に銘ずべきです。なお、 $\delta(E)$ が負の傾きで $\pi/2$ の奇数倍を通過するのを反共鳴(anti-resonance)と呼ぶこともあります。

術語「共鳴」には様々な使い方があります。これらを別稿にまとめておきました。³⁾

9.11 フェッシュバツハ共鳴

現実の原子分子の共鳴状態は一般に構成粒子同士への崩壊や電磁波の放出など、複数チャンネルへの崩壊が可能です。崩壊生成物の量子状態を指定すれば崩壊チャンネルが決まります。逆に、そのうちいずれかから始まる過程が考えられ、いろいろな初期チャンネル、終チャンネルの組み合わせにより、共鳴状態を経て起こる弾性・非弾性散乱、光電離や光解離、構成粒子同士の入れ替えが起こる衝突(例えば、2原子分子ABの反応性衝突 $AB + C \rightarrow ABC \rightarrow A + BC$ や解離性電子付着 $e^- + AB \rightarrow AB^- \rightarrow A^- + B$)等々が決まります。

弾性散乱の一例が、第9.3節でちょこっと触れたヘリウム原子の2電子励起状態を経る



です。入射電子が基底状態のヘリウムイオン He^+ と衝突してこれを $2s$ 状態に一時、励起します。もしも入射電子の運動エネルギーが $2s$ 状態の励起に ΔE だけ足りず、その ΔE が $\text{He}^+(2s)$ の周りの ns 軌道の束縛エネルギーにうまく合えば入射電子は $\text{He}^+(2s)$ に捕えられ、2電子励起状態 $\text{He}(2sns)$ が作られます。しばらく時間が経って2電子間相互作用により $2s$ 電子が $1s$ 軌道に落ち、その分のエネルギーを ns 電子に与えて再び飛び出させれば、共鳴弾性散乱(9.29)が起こります。

原子同士やイオン-原子間の遅い衝突 $A+B$ での各チャンネルの相互作用は、全衝突系の2原子分子(イオン)のポテンシャルエネルギー曲線で表されます。それに基づけば、ヘリウムの2電子励起状態を経る過程と似た状況を図29のように説明できます。基底状態のA, Bが相互作用 $V(r)$ に従い近づくと、相対運動エネルギーを内部エネルギーに転換してBを励起するとします。励起した B^* とAの相互作用 $V^*(r)$ が束縛準位 E_{FR} をもてば、衝突エネルギー E がこれに等しいときこの状態が作られます。しばらく後に再び内部エネルギーが相対運動に返され、元の基底状態チャンネルに戻った衝突系がAとBに別れていけば準位 E_{FR} を中間状態として経る共鳴弾性散乱が起きたことになります。

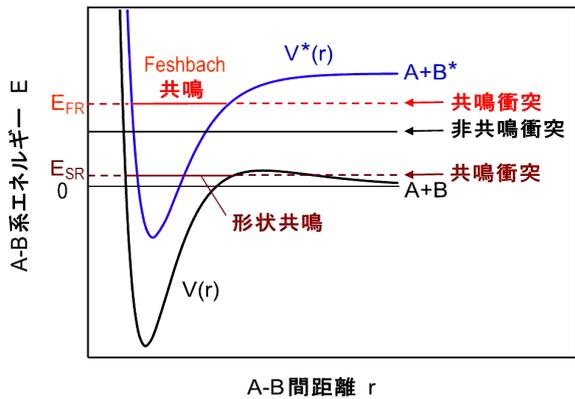


図 29. 弾性衝突 A + B での形状共鳴とフェッ
シュバツハ共鳴の機構の概念図.

実際には A, B は数多くの内部状態をもち、数多くのチャンネルの間をやり動く効果(結合)を考慮して初めて共鳴をきちんと議論できます。図 29 の $V^*(r)$ と $V(r)$ の間にもう一つチャンネルがあれば、 $V^*(r)$ にできた束縛状態は(対称性の制約などから禁止されない限り)、一般にそのチャンネルへも崩壊できます。例えば、過程 (9.29) の入射電子がもう少し高いエネルギーをもち、共鳴状態 $\text{He}(3sns)$ を作れ、それが壊れて一つの電子が散乱電子として放出されるとき、残されたヘリウムイオンは $1s, 2s, 2p$ のどの状態にいても構いません。これは多チャンネル衝突です。

複数チャンネルが関わる共鳴を多チャンネル共鳴と呼びます。図 29 は最も単純な弾性散乱の概念的な解説に過ぎないご理解ください。また、電子と原子や分子との相互作用は一般に単純な曲線の形に描けるものではなく、図 29 を電子衝突の共鳴の説明に使うと誤解を招きかねません。

いずれにせよ、衝突粒子の一方か両方の内部状態がその過程の初期チャンネルより励起され、特定衝突エネルギーで一時的に、相対運動に束縛準位 E_{FR} ができ、衝突粒子対が結合した状態、またその現象を、その理論を構築した核物理学者にちなみフェッシュバツハ共鳴(Feshbach resonance)と呼びます。¹⁶⁾ むろんこれは(2チャンネル以上の)多チャンネル共鳴です。構成粒子間の相互作用により内部エネルギーが再び相対運動に戻されて低いチャンネルの連続状態に移ればこの束縛状態

は壊れるので、実は準束縛状態、共鳴状態です。励起される内部状態は電子状態とは限りません。例えば、分子の振動状態を励起して運動エネルギーを失った入射電子が分子に一時捕まる振動フェッシュバツハ共鳴も知られています。

過程 (9.29) で形成される中間状態 $\text{He}(2sns)$ も、初期チャンネルの $\text{He}^+(1s)$ が $\text{He}^+(2s)$ に励起されてできるフェッシュバツハ共鳴です。 $\text{He}^+(2s)$ と ns 電子との相互作用はクーロン型の漸近形をもち、無限個の ns 軌道が2電子励起リユードベリ系列をなします。 $2s$ 電子と ns 電子のエネルギー交換により $\text{He}(2sns)$ がチャンネル $\text{He}^+(1s) + e^-$ に崩壊するのですから、2電子間有効距離が大きくて相互作用が小さい、より大きな n の $\text{He}(2sns)$ ほど寿命が長く、共鳴幅が狭くなります。

荷電粒子と中性原子との遠距離相互作用は、ふつう、 r^{-4} に比例する分極相互作用になりますが、水素原子やポジトロニウム e^+e^- など水素型原子が励起状態にあると、その正負電荷が作る双極子モーメントの1次摂動が生き残り、入射荷電粒子との間に r^{-2} に比例する長距離相互作用をもつチャンネルも現れます。それが強い引力なら、束縛エネルギーが等比数列をなす無限個の束縛軌道がそのチャンネルに生じ、¹⁷⁾ これより低いチャンネルの連続状態と結合してフェッシュバツハ共鳴の無限系列ができることをロシアのガイリティス(Gailitis)とダンブルグ(Damburg)が1963年に示しました。¹⁸⁾ これを双極子共鳴系列と呼びます。共鳴幅も等比数列をなします。高い n ほど狭い幅、長い寿命を示すことは、ヘリウムの2電子励起リユードベリ系列と同じ事情です。

漸近相互作用 $-ar^{-2}$ は励起水素型原子の縮退副準位により起こるので、相対論効果、量子電磁力学効果によりこの縮退が ΔE ほど解ければ、 $ar^{-2} < \Delta E$ となるような $r \simeq \tilde{A}$ 以上ではもはや近似的にも縮退準位とはみなせず、 $\propto r^{-2}$ の形は崩れ、より早く減衰します。そのため、ポテンシャル $-ar^{-2}$ の $r < \tilde{A}$ までの部分に ΔE より深く束縛される軌道しか生き残れず、2電子励起無限系列は実は少ない数で途切れます。⁵⁾

3 粒子系 ABC のどの構成 2 粒子対 AB, BC, CA にも束縛状態がない場合でも, 系 ABC にはときに無数の束縛状態があることをロシアのエフィモフ (Efimov) が 1970 年に示しました.^{19,20)} これは, 3 粒子系のエネルギーを超球半径 ρ というある座標の関数として表すとき, 2 粒子間衝突の散乱長 A (第 0.2 節) の絶対値ほどの距離まで双極子場 $\propto \rho^{-2}$ が現れるために起こる等比数列束縛状態として説明できます (付録 9B).²¹⁻²⁴⁾ 短距離型の核力に支配される原子核系にすら表れ得る奇妙な長距離力効果です. この束縛状態がより低いチャンネルと結合して双極子共鳴状態になったものによると解釈される現象が極冷原子気体で観測され, 注目されています.²¹⁻²⁵⁾

$2sns$ などという独立粒子記法は n が大きければ便利ですが, 小さい n では電子相関が強くて不適切です. n が大きくても, 例えば $2snp$ は必ず $2snp \pm 2pns$ のように配置混合を起こし, これを $(sp, 2n+)$, $(sp, 2n-)$ などと表すこともあります. また, $\text{He}^+(n \geq 3)$ の周りにもう一つ電子が束縛された 2 電子励起状態では, いくつかの電子配置がかなりの重率で混ざり, 主な電子配置が決まらないことも多く, 電子配置に基づく記法は不便です. そこで, 電子相関が強い場合に適した新しい量子数を使う記法がいまは一般的です.²⁶⁾

開いたチャンネルが N 個ある多チャンネル問題は, それらの間の遷移をすべて表す $N \times N$ S 行列により記述されます. したがって, 多チャンネル問題の共鳴理論は $N \times N$ 行列を用いて展開されます.

第 9.6 節で紹介したファーノの共鳴論文⁶⁾ には, 共鳴状態が複数個のチャンネルへ崩壊する多チャンネル問題も議論されています. また, 崩壊チャンネルが一つでも, 複数個の共鳴が重なり合う場合, つまり, S 行列の言葉では式 (9.16) に代表される場合へも理論が拡張されています. ところが, 複数崩壊チャンネル問題での重なり共鳴は論じられていません. 実は, これが非常に難しい問題で, S 行列の共鳴公式がいくつか提案されてはいるものの, いずれも何らかの欠点を抱え, 完璧な表式が未だに見つかっていません.⁵⁾

9.12 形状共鳴

図 24 のシュタルク効果による共鳴状態, 準束縛準位はポテンシャル障壁の左側にある谷が作る束縛準位がトンネル効果で右方向にしみ出すために形成されています. つまり, 一つのポテンシャルの形が原因で共鳴状態が生まれ, 壊れるので, この共鳴機構をポテンシャル共鳴, 形状共鳴 (shape resonance) などと呼びます. 図 29 では, チャンネル A+B のポテンシャル $V(r)$ の引力部に作られる束縛状態がトンネル効果で障壁を突き抜けて壊れることにより形状共鳴 E_{SR} が現れる様を示しています.

フェッシュバッハ共鳴と違い, 一つのチャンネルの相互作用が生成・崩壊両機構を担うので, 1 チャンネル共鳴, 単一チャンネル共鳴などとも呼びます. 実際には, 衝突中に一時ほかのチャンネルに移る多チャンネル効果をふつう無視できませんが, それでも生成崩壊機構が「主に」一つのチャンネルのポテンシャルに基づけば, それは形状共鳴です.

図 29 の $V^*(r)$ のような励起チャンネルポテンシャルにもしも強い引力部と障壁があれば, そのチャンネルに形状共鳴が生じることもあります. それが多チャンネル効果で下のチャンネルに壊れていく可能性があるとしても, $V^*(r)$ のチャンネル自体にも壊れていくなら, 本質は形状共鳴と言えます.

多くの場合, 斥力の遠心力ポテンシャルと内側の引力ポテンシャルの重ね合せで形状共鳴を生む障壁が生じます. 演習問題でよく出てくる球対称ポテンシャルによる散乱では, 角運動量は保存され, 各部分波を独立に扱え, 遠心力ポテンシャルの働きは明らかに見えます. しかし, 現実の原子分子過程では, 相対運動の角運動量が異なるチャンネルとの結合が無視できないのがふつうです. 形状共鳴を説明するポテンシャルの図は, あくまでも直感に訴える解説のために簡略化された概念図に過ぎないにご理解ください.

水素原子負イオン $\text{H}^-(1S)$ の光吸収連続スペクトルで, $\text{H}(n=2)+e^-$ と崩壊する励起チャンネルが開くしきいエネルギーの直下に双極子共鳴系列 (フェッシュバッハ共鳴) がありますが, しきい

エネルギーのすぐ上にも幅広い共鳴構造が見られます。これはこのチャンネルの有効ポテンシャルが作る形状共鳴に依ると解釈されます。電子と原子や分子との相互作用は単純な一つの曲線では表せないと申しました。しかし、 H^- のような3体系の低いエネルギー状態に対しては、超球座標という特殊な座標系を使うとかなり良い近似で曲線として有効ポテンシャルを表すことができます。この理論手法によると、確かに光吸収後の励起チャンネル $H(n=2)+e^-$ (これは2電子の角運動量合成が異なる三つの 1P チャンネルを含みます)には図29の $V(r)$ のように深い谷と障壁をもつ有効ポテンシャルがあり、これが形状共鳴を担っていることが分かります。⁵⁾

ポテンシャルを単純に図示できない場合でも、一つのチャンネルの効果だけで本質を説明できる共鳴過程なら、それは形状共鳴によるものと理解できます。実際、基底電子状態のアルカリ原子や多くの分子が低エネルギー電子と相互作用して形状共鳴を示します。²⁷⁾

多チャンネル衝突系で、あるチャンネルが開くしきいエネルギーよりもわずかに低く現れる共鳴はフェッシュバッハ共鳴、わずかに高いエネルギーに現れるものは形状共鳴と単純に分類してしまうのが通例です。これにより何か不都合を生じたという報告に筆者は接していません。

原子や分子の束縛状態エネルギーを求める量子化学計算では、変分原理(最小原理)により、計算を改良するに従い値が下がります。最小原理が成立しない電子衝突でも、計算を改良するに従い共鳴エネルギーがふつう下がるのが経験的に知られています。形状共鳴と思われたものが計算の改良でチャンネルのしきいエネルギーより下がり、実はフェッシュバッハ共鳴だと分かった例も報告されています。原子や分子の電子親和力(電子を1個余分に束縛することにより低下するエネルギー量)の量子化学計算では、中性原子分子と負イオンをバランスよい精度で計算しないと信頼できる値が得られません。電子衝突でも、標的原子分子の電子状態計算と衝突計算

をバランスよい精度で行わないと、形状共鳴とフェッシュバッハ共鳴を正しく識別できません。もっとも、しきい値をまたいで共鳴エネルギーがわずかに変わり、形状共鳴がフェッシュバッハ共鳴に変わっても、共鳴波動関数の本質部分、大振幅の部分はほとんど変わりません。

有効ポテンシャルの障壁の内側で引力が強ければ、二つ以上の形状共鳴状態もあり得ます。そのとき、高い状態ほど感じる障壁が弱く、強いトンネル効果でやすやすと崩壊してしまうので、共鳴幅はより広いはずです。2電子励起フェッシュバッハ共鳴系列では高い状態ほど共鳴幅が狭いことを前節で説明いたしました。崩壊機構が違えば逆の傾向を示すことにご注意ください。

9.13 極冷量子気体と共鳴過程の制御

原子や分子の電子状態は一般に外場により変化します。第9.3節で触れたシュタルク効果は束縛状態が静電場の影響を受ける例でした。束縛状態まがいの共鳴状態も外場に影響されてしかるべきでしょう。実際、静電場が光電離断面積の共鳴構造を変える効果が綿密に観測されています。

位相のずれ、散乱振幅、断面積などが特定エネルギー近辺で急激に変動するのが共鳴過程の特徴で、その原因は中間状態として作られる共鳴状態にあると述べました。その共鳴状態を磁場で制御する技術が近年、注目を受けています。磁場を走査することによりほぼゼロエネルギーの衝突に、つまり極低温気体内衝突で共鳴を起こすように、または共鳴を避けるように操ることができます。これにより、極低温気体の性質を大幅に変えることができます。

原子気体を極低温に下げると、気体原子の熱運動のドブロイ波長が平均原子間距離に匹敵するほど長くなり、気体中の同種原子の識別不能性という量子論効果が無視できない巨視的量子系と考える必要が生じます。気体原子がボーズ-アインシュタイン統計(Bose-Einstein statistics)に従うボーズ粒子なら、数多くの原子が同じ量子状態 $\psi(\mathbf{r}_i)$ を占め、そのうちどの二つを入れ換

えてもその波動関数 $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) = \prod_i \psi(\mathbf{r}_i)$ に変わりがないという巨視的状态が実現できます。

この現象は1920年代にボーズの理論を発展させてアインシュタインが提案し、ボーズ-アインシュタイン凝縮 (Bose-Einstein condensation, BEC) と呼ばれています。²⁸⁻³⁰⁾ しかし、その実現に必要な極低温は、当時としては非現実的なものでした。その後、液体 ^4He の超流動、超伝導の本質はBECであることが認識され、また中性原子の冷却と捕獲の技術が驚異的に進歩し、²⁹⁻³¹⁾ 1995年にまずルビジウムで、続いてナトリウム、リチウムで相次いで、 $10^{-6} \sim 10^{-7}$ K ほどに冷却された原子気体の BEC が実現されました。BEC の巨視的コヒーレンスは物質波の原子レーザーを生み、光の世界での諸現象の原子波版に道を開き、また、極低温縮退フェルミ気体やボーズ-フェルミ混合系の研究へと展開していきます。極冷却原子気体の最近の話題については、例えば文献 22) をご参照ください。

極冷却原子気体内ではほぼゼロの相対速度で原子間衝突が起こっています。中性原子間にはクーロン相互作用、双極子相互作用、分極相互作用のような長距離相互作用は働かないので、短距離型ポテンシャル下での極低速 s 波衝突だけ考えればよく (第0.2節)、それが極冷気体の性質を司っています。そこで、極低エネルギー $E = \hbar^2 k^2 / 2\mu$ (μ は衝突系の換算質量で、同種粒子2体系ではその質量の半分) での s 波衝突を調べます。

その断面積は s 波の位相のずれ δ_0 により、

$$\begin{aligned} \sigma_0 &= (C/k^2) \sin^2 \delta_0 \\ &= C/[k^2 + (k \cot \delta_0)^2] \end{aligned} \quad (9.30)$$

と書けます (第0.2節, 式 (0.6))。異種粒子間衝突では $C=4\pi$ です。同種粒子同士の衝突では2粒子とも区別できずに散乱粒子として観測してしまうので、断面積の定義自体に因子2の任意性があります (第6.2節最後の部分)。

低エネルギー衝突では $k \cot \delta_0$ の式 (0.7) が使えますが、^{32, 33)} μK 以下の極冷気体中での原子衝突のように k^2 が極端に小さければ、わずか一つ

のパラメータ A だけで断面積が式 (0.8) のように決まります。散乱長 A については第0.2節でかなり詳しく論じました。この A を人為的に制御できれば原子間力を制御したことになります。

なお、(同一内部状態の) 同種フェルミ粒子同士の衝突ではその対称性から s 波衝突が禁止されて弱い p 波衝突が見えるなど、フェルミ系の議論には注意が必要です (第6.4節)。

図29に戻りましょう。原子 B , B^* がもつ磁気モーメントが異なれば、極冷量子気体に磁場 B を走査しながらかけることにより、 $V(r)$ に対する $V^*(r)$ の相対位置を人為的にずらすことができ、フェッシュバハ共鳴のエネルギー位置 E_{FR} を制御できます。 $E_{\text{FR}} \simeq 0$ とできれば A は巨大な負値を、 $E_b \simeq 0$ の束縛状態ができれば巨大な正值を実現できます。その近辺で B を走査すれば、事実上、 $-\infty$ から $+\infty$ まであらゆる A の値を実現して極冷量子気体の性質を制御することができます (図30)。^{34, 35)} 光学的手法で周波数走査により A を制御することもできますが、ここでは説明を省略いたします。³⁵⁾

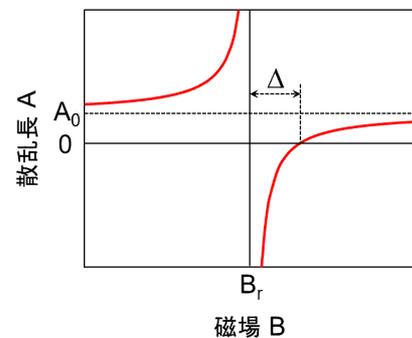


図 30. 磁場 B により広範囲に亘り制御された散乱長 A の概念図. $A(B) \simeq A_0 [1 - \Delta / (B - B_r)]$ と3個のパラメータを使い近似できる。共鳴磁場 B_r で $|A|$ が無限大になる。

なお、冷却原子気体の分野では、ある特定の磁場 B_r で $|A|$ が無限大になる現象自体を単純にフェッシュバハ共鳴と称したり、この磁場を共鳴磁場と呼んだりします。

磁場制御された極冷量子気体内原子衝突の議論では、実は図29に相当するポテンシャルは磁

場で分離されたゼーマン準位にある原子同士が作る2原子分子のポテンシャル曲線で、狭いエネルギー間隔でいくつも集まっています。また、一般にそれらよりも低いエネルギーのチャンネルがあっても結合が弱ければ無視できます。

極低エネルギーで2体フェッシュバッハ共鳴が起こると、3体再結合反応 $A + A + A \rightarrow A + A_2$ も促進されます。また、フェッシュバッハ共鳴状態を通じたいくつかのチャンネル間の結合により非弾性衝突も促進されます。これらの過程により内部エネルギーが相対運動に転換し、加速された原子 A や分子 A_2 が極冷気体から逃げる量を磁場 B の関数として検出すれば、そのピーク位置から極低速2体衝突の共鳴磁場 B_r が知れます。冷却原子が逃げ出さず、ポーズ-アインシュタイン凝縮が安定に永らえるためには、磁場を走査して適切な散乱長 A を選びます。

極低エネルギーフェッシュバッハ共鳴と同様の機構で弱く束縛された2体束縛状態のことを極冷気体分野ではフェッシュバッハ分子と名付けています。ただし、この用語はしっかり定義されずに比較的あいまいに使われているようです。³⁵⁾ フェッシュバッハ分子は多分野に亘って役に立つ極冷分子の生成に利用できます。^{34, 35)} また、磁場 B を走査しつつ $E < 0$ の2体束縛状態を分光して第0.2節、式(0.9)の束縛エネルギー $|E_b(B)| = (\hbar^2/2\mu)[A(B)]^{-2}$ を知れば散乱長 $A(B)$ が分かり、式(0.8)により $E > 0$ での極低速原子衝突断面積も分かります。^{34, 35)}

相互作用のエネルギースケールが何桁も異なる原子物理でも核物理でも、一つのパラメータ A で低速衝突断面積や弱い束縛状態、仮想状態のエネルギーを表せるという事実は昔からよく知られた散乱理論の基礎知識です。でも、それが巨視的な数の原子の集合体である極冷量子気体の性質を左右し、かつそれを磁場制御する研究が大きく発展し、広い分野で共通に役立つことから、最近ではしばしばこの性質を「普遍性」(universality)と呼ぶようになりました。エフィモフ効果も少ないパラメータで核物理、原子物

理に共通の特異な現象を美しく記述できるとともに、極冷量子気体でそれを実現でき、正に普遍性のもう一つの具体例になっています。²¹⁾

原子物理、核物理の共鳴には主にエネルギー依存性の特異性を論じた長い歴史があります。極冷量子気体研究の発展は、その中で起こる原子衝突の共鳴を外場で制御するという、実験技術の進展に伴う新たな物理的視点を導入しました。狭い空間に閉じ込められた少数粒子系への拡張として、光格子や量子ドット内での原子衝突の共鳴も、最近、関心をもたれています。原子物理の共鳴は諸分野で新たな展開を見せています。

付録9A 射影演算子

2次元ベクトルを x 軸や y 軸に射影するように、 $(\phi, \varphi) = 0$, $(\phi, \phi) = 1$ を満たす直交関数で表せる $\psi = c\phi + \varphi$ から成分 $c\phi$ を抜き出す演算子 \hat{Q} が射影演算子の例で、これはディラックのブラ $\langle \dots |$ とケット $|\dots\rangle$ で $\hat{Q} = |\phi\rangle\langle\phi|$ と書けます。実際、

$$\hat{Q}\psi = |\phi\rangle\langle\phi|c\phi + \varphi = c|\phi\rangle \quad (9A.1)$$

と示せます。逆に、 ϕ 成分を取り除く演算子、ある軌道 ϕ を禁止する演算子は $1 - |\phi\rangle\langle\phi|$ で、実際、 $[1 - |\phi\rangle\langle\phi|]\psi = \psi - c\phi = \varphi$ と分かります。

$\hat{Q} = |\phi\rangle\langle\phi|$ により $\hat{H}_Q = \hat{Q}\hat{H}\hat{Q}$ と定義された演算子について固有値方程式 (9.1) は

$$\begin{aligned} E_Q\phi &= \hat{Q}\hat{H}\hat{Q}\phi = |\phi\rangle\langle\phi|\hat{H}|\phi\rangle\langle\phi| \\ &= \langle\phi|\hat{H}|\phi\rangle\phi \end{aligned} \quad (9A.2)$$

と書き換えられ、これは期待値 $E_Q = \langle\phi|\hat{H}|\phi\rangle$ の定義と同等なことが分かります。

ϕ をヘリウム原子の $1s$ 軌道とした射影演算子 $|1s\rangle\langle 1s|$ は波動関数から $1s$ 軌道を抽出し、逆に、 $1 - |1s\rangle\langle 1s|$ は $1s$ 成分を取り除く演算子です。したがって、2電子励起状態を作るには、ヘリウムのどちらの電子にも $1s$ 軌道を許さない演算子

$$\hat{Q} = \{1 - |1s(1)\rangle\langle 1s(1)|\}\{1 - |1s(2)\rangle\langle 1s(2)|\} \quad (9A.3)$$

を施したハミルトニアン $\hat{H}_Q = \hat{Q}\hat{H}\hat{Q}$ の固有関数を求めればよいのです。

付録 9B エフィモフ効果

同種粒子 A の 3 体系 A-A-A を例に取ります。その大きさの目安を表す、超球半径と呼ばれる座標 $\rho (= [r_{12}^2 + r_{23}^2 + r_{31}^2]^{1/2})$, r_{ij} は各粒子間距離) を使って 3 体系のシュレーディンガー方程式を表すとき, A-A 間相互作用の到達距離を a , A-A 衝突の散乱長を A とすると, $a < \rho < |A|$ では ρ^{-2} に比例する有効ポテンシャルが現れます。 A が $\pm\infty$ なら 3 体系は $\rho \rightarrow \infty$ まで場 $\propto \rho^{-2}$ に従い, 第 9.11 節で解説した非相対論的 2 電子励起 H^- と同じく束縛状態の無限等比系列が現れ, これをエフィモフ効果と呼びます。¹⁹⁻²⁵⁾ $|A|$ が有限でも大きければ, 同節の相対論的 H^- の \tilde{A} を $|A|$ に置き換えたような有限系列ができます。これらの 3 体系束縛状態が連続状態と結合すれば双極子フェッシュバツハ共鳴系列になります。A-A 間 2 体力が短距離型でも, 束縛状態 A_2 がなくても本質は同じで, 中性 3 原子系, 原子核系にもこの効果は生じ得ます。異種粒子系や 4 体系以上でもこの効果が現れることもあり, いろいろな例が理論的に研究されています。また, 磁場をかけて A を制御 (第 9.13 節) してエフィモフ効果を起こし, フェッシュバツハ共鳴によって促進された 3 体再結合による極冷原子気体からの原子損失が観測されています。^{23, 25)}

第 9 章 文献・注

- 1) J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **42**, No. 4, Special Issue on Resonances: From Few-Body to Many-Body Phenomena (2009).
- 2) Advances in Quantum Chemistry **60** (2010), Unstable States in the Continuous Spectra, Part I; **63** (2012), Part II.
- 3) 島村 勲, しょうとつ, 第 2 巻第 2 号 (2005).
- 4) N. Michel et al., J. Phys. G **36**, 013101 (2009).
- 5) I. Shimamura, Ref. 2), Part II, Chap. 4 (2012).
- 6) U. Fano, Phys. Rev. **124**, 1866 (1961).
- 7) N. Moiseyev, Phys. Rep. **302**, 211 (1998).
- 8) 砂川重信 [2], §3.6.
- 9) L. D. Landau and E. M. Lifshitz [8], §134.
- 10) B. H. Bransden and C. J. Joachain [4], §12.3.
- 11) 砂川重信 [2], §3.2.
- 12) 高柳和夫 [3], §2-3.
- 13) ファーノ公式は式 (9.8), (9.10) と等価だが, $\delta_b = 0$ のローレンツ型だけを断面積のブライト-ウィグナー公式と呼ぶ人々もいる。
- 14) D. Bohm, Quantum Mechanics (Prentice-Hall, New York, 1951), Chap. 11.
- 15) L. D. Landau and E. M. Lifshitz [8], §133.
- 16) H. Feshbach, Ann. Phys. (N.Y.) **19**, 287 (1962).
- 17) この中性励起原子の周りにできる軌道もしばしば nl 軌道と呼ばれるが, イオンの周りのリュードベリ軌道とは全く違うので要注意。
- 18) M. Gailitis and R. Damburg, Proc. Phys. Soc. (London) **82**, 192 (1963).
- 19) V. Efimov, Phys. Lett. B **33**, 563 (1970).
- 20) V. Efimov, Sov. J. Nucl. Phys. **12**, 589 (1971) [Yad. Fiz. **12**, 1080 (1970)].
- 21) C. H. Greene, Phys. Today **63**(3), 40 (2010).
- 22) 上田正仁, 応用物理 **82**, 744 (2013).
- 23) Y. Wang, J. P. D’Incao, and B. D. Esry, Adv. At. Mol. Opt. Phys. **62**, 1 (2013).
- 24) 島村 勲, 日本物理学会誌 **70**, 168 (2015).
- 25) G. Modugno, Physics **7**, 51 (May 12, 2014).
- 26) U. Fano and A. R. P. Rau, Atomic Collisions and Spectra (Academic, Orlando, 1986).
- 27) G. J. Schulz, Rev. Mod. Phys. **45**, 378, 423 (1973).
- 28) B. H. Bransden and C. J. Joachain [4], §15.5.
- 29) 上田正仁, 日本物理学会誌 **53**, 663 (1998).
- 30) 久我隆弘, 日本物理学会誌 **55**, 90 (2000).
- 31) B. H. Bransden and C. J. Joachain [4], § 15.4.
- 32) J. Schwinger (1947) [J. M. Blatt, Phys. Rev. **74**, 92 (1948) により引用].
- 33) L. I. Schiff [5], §39.
- 34) T. Köhler, K. Góral, and P. S. Julienne, Rev. Mod. Phys. **78**, 1311 (2006).
- 35) C. Chin et al., Rev. Mod. Phys. **82**, 1225 (2010).

教科書

- [1] 江沢洋, 量子力学 I, II (裳華房, 2002).
- [2] 砂川重信, 散乱の量子論 (岩波書店, 1977).
- [3] 高柳和夫, 電子・原子・分子の衝突 (培風館, 1972, 改訂版 1996).
- [4] B. H. Bransden and C. J. Joachain, *Physics of Atoms and Molecules*, 2nd ed. (Pearson Education, Harlow, 2003).
- [5] L. I. Schiff, *Quantum Mechanics*, 3rd ed. (McGraw-Hill, N.Y., 1968) [井上健 訳, 量子力学 (吉岡書店, 1970)].
- [6] N. F. Mott and H. S. W. Massey, *The Theory of Atomic Collisions* (Oxford Univ. Press, 1965) [高柳和夫, 市川行和, 島村勲 訳, 衝突の理論 (吉岡書店, 1975~77)].
- [7] M. S. Child, *Molecular Collision Theory* (Academic, N.Y., 1974).
- [8] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics* 3rd ed. (Pergamon, Oxford, 1977) [佐々木健 訳, ランダウ・リフシツ 量子力学 (東京図書)].
- [9] R. D. Levine, *Molecular Reaction Dynamics* (Cambridge Univ. Press, 2005) [鈴木俊法, 染田清彦 訳, 分子反応動力学 (シュプリンガー・ジャパン, 2009)].
- [10] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë, *Quantum Mechanics* (Hermann, Paris, 1977).
- [11] 小谷正雄, 梅沢博臣 編, 大学演習 量子力学 (裳華房, 1959), 第 8 章 (江沢洋).
- [12] 高柳和夫, 原子衝突 (朝倉書店, 2007).

別冊「しょうとつ」2

シリーズ「衝突論ノート」より 考える衝突論

2017年 7月 5日 初版発行

2019年 3月 15日 改訂版発行

原子衝突学会編

Copyright © 2017, 2019 The Atomic Collision Society of Japan