クーロンポテンシャルによる散乱

シキノ *

August 17, 2021

Contents

*https://slpr.sakura.ne.jp/qp/, https://twitter.com/sikinote

1　全体概要

電荷 q_A を持つ原子核に、遠方から q_B を持つ電子が衝突する過程を考えます。例えば、水素原子の原子核である陽子 1 個 ($q_B = +e$, e は電気素量) に対し、遠方から電子 ($q_A = -e$) が衝突する過程です。相対座標に対する時間依存しないシュレーディンガー方程式は、

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + \frac{q_A q_B}{4\pi\varepsilon_0 r}\right]\psi_c(\mathbf{r}) = E\psi_c(\mathbf{r}) \tag{1}$$

と書くことができます。ここで、$\hbar$ はプランク定数、ε_0 は真空の誘電率、μ は A と B の換算質量を表し, E は衝突のエネルギーを表します。簡単にするために係数をまとめて

$$\left[\nabla^2 - \frac{U_0}{r} + k^2\right]\psi_c(\mathbf{r}) = 0 \tag{2}$$

と書きます。ここで、

$$U_0 \equiv \frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{q_A q_B}{4\pi\varepsilon_0},\quad k \equiv \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}} \tag{3}$$

という量を定義しました。これから、運動量 k で定義される平面波が入射したらどのように応答するか？を知りたいので、Eq. (1) を境界条件

$$\psi_c(\mathbf{r})|_{z\to-\infty} = e^{ikz} \tag{4}$$

の下で解いていきます。

導出した結果は、

$$\begin{aligned}\psi_c(\mathbf{r})\Big|_{|r-z|\to\infty} &= \exp\left[ikz - i\gamma\ln\Big\{kr(1-\cos\theta)\Big\}\right]\left(1+\frac{\gamma^2}{ikr(1-\cos\theta)}+\cdots\right)\\ &\quad + f(k,\theta)\frac{\exp\Big\{ikr - i\gamma\ln(2kr)\Big\}}{r}\end{aligned} \tag{5}$$

となります。この展開は $|r-z| \to 0$ となる z 軸上もしくは z 軸近傍では使えないことを注記しておきます。元々の境界条件 Eq. (4) は、$z \to -\infty$ だけで決まっており x, y には条件はありませんが、結論として得られるものは z 軸からは離れた領域でなければならない、とより制限された範囲でのみ導ける、となっています。

ここで

$$\gamma = \frac{U_0}{2k} = \frac{q_A q_B}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{\hbar\nu} = \frac{q_A q_B}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\mu}{\hbar^2 k} \tag{6}$$

であり、γ は Sommerfeld parameter と呼ばれる量であり、$\nu = \frac{\hbar k}{\mu}$ は 2 粒子間の相対速度を表しています。また、

$$f(k,\theta) = -\frac{\gamma}{2k\sin^2\frac{\theta}{2}}\exp\left\{-i\gamma\ln\left(\sin^2\frac{\theta}{2}\right)\right\}\frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)} \tag{7}$$

はクーロン散乱振幅と呼ばれる量であり、波数 k を持って入射した平面波が、入射方向に対して角度 θ 方向にどれだけ球面波が歪むか？を表す量です。また、$\Gamma(x)$ はガンマ関数であり、

$$\frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)} = \exp(2i\sigma_0) \tag{8}$$

と書かれる場合があります。

Eq. (5) の第一項は入射波、第二項は外向きの球面波を表します。指数関数の中にある ln を含む項は対数の発散で、平面波 e^{ikz} の形を妨げていることが分かります。これは、クーロンポテンシャルが長距離ポテンシャルであることに由来し、どんなに遠くであっても散乱の影響を受けることを意味します。別の言い方をすれば、クーロンポテンシャルの散乱半径が無限大だということを表しています。

2 散乱問題

時間依存しないシュレーディンガー方程式を変形した

$$\left[\nabla^2 - \frac{U_0}{r} + k^2\right]\psi_c(\mathbf{r}) = 0 \tag{9}$$

を、境界条件

$$\psi_c(\mathbf{r})|_{z\to-\infty} = e^{ikz} \tag{10}$$

の下で解いていきます。この境界条件の想定は、波数 k を持つ平面波が $z \to -\infty$ から入射し、原点に存在する原子核により散乱が起こり、外向きの球面波となる過程を想定しています。

2.1 なぜ平面波で入射する解を考える？

なぜ平面波で入射する解を考えるのでしょうか？これは、フーリエ変換が関係しています。例えば実験で用意できる波束は、必ず有限の範囲の波束となります。そのため、理想的な平面波は存在せず、近似的に平面波として扱うか、有限範囲の波束のまま扱わなければなりません。前者の場合は平面波の議論そのままで問題ありませんが、後者の場合は平面波で表すことはできません。そこでフーリエ変換が登場します。任意の初期状態が用意された時、平面波の重ね合わせとして表現できるというのがフーリエ変換なので、平面波に対する応答が分かれば任意の初期状態に対する応答が分かる、という狙いがあります。これが平面波で入射する解を考える理由の一つです。

2.2 散乱状態の導出

さて、原子のようなクーロンポテンシャルの問題は、球面座標系や放物座標系などで変数分離を行うことが可能です。現在考えたい問題は、平面波がクーロンポテンシャルによってどのように散乱されるかを考える問題です。平面波という特定の方向が存在する問題は、球面的な状態と特定の直線的な方向が存在します。その場合、放物座標系を用いて変数分離していくのが便利です。

放物座標系は、

$$\begin{cases} \xi = r + z, & (0 \le \xi < \infty) \\ \eta = r - z, & (0 \le \eta < \infty) \\ \phi = \tan^{-1}\left(\dfrac{y}{x}\right), & (0 \le \phi < 2\pi) \end{cases} \tag{11}$$

で表現される座標系です[1]。この座標系では、ラプラシアンは

$$\nabla^2 = \frac{4}{\xi+\eta}\left(\frac{\partial}{\partial\xi}\xi\frac{\partial}{\partial\xi}+\frac{\partial}{\partial\eta}\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\right)+\frac{1}{\xi\eta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \tag{12}$$

と表されます。散乱解は、z 軸対称であるため、ϕ に対する依存性はありません[2]。つまり、散乱解 $\psi_c(\mathbf{r})$ の ϕ を含む部分は $\frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}}$ と解は書かれますが、ϕ 依存性がないので、$m=0$ でなければなりません。よって

$$\psi_c(\mathbf{r}) = \psi_c(\xi,\eta) \tag{13}$$

となります[3]。

式変形していきましょう。

$$\left[\nabla^2 - \frac{U_0}{r} + k^2\right]\psi_c(\mathbf{r}) = 0 \tag{14}$$

$$\left[\frac{4}{\xi+\eta}\left(\frac{\partial}{\partial\xi}\xi\frac{\partial}{\partial\xi}+\frac{\partial}{\partial\eta}\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\right)+\frac{1}{\xi\eta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}+k^2-\frac{2}{\xi+\eta}U_0\right]\psi_c(\xi,\eta) = 0 \tag{15}$$

$\frac{\xi+\eta}{4}$ を掛けて、

$$\left[\frac{\partial}{\partial\xi}\xi\frac{\partial}{\partial\xi}+\frac{1}{4}k^2\xi+\frac{\partial}{\partial\eta}\eta\frac{\partial}{\partial\eta}+\frac{1}{4}k^2\eta-\frac{U_0}{2}\right]\psi_c(\xi,\eta) = 0 \tag{16}$$

となります。ここで分離定数 $\tilde{\nu}_1, \tilde{\nu}_2$ を導入します。ここで分離定数は、

$$\frac{U_0}{2} = \tilde{\nu}_1 + \tilde{\nu}_2 \tag{17}$$

を満たすように決定します。今、Eq. (16) の [ ] 内の演算子は ξ と η の部分で独立しており、それぞれの和で書けています。この場合、解はさらに変数分離可能で、

$$\psi_c(\xi,\eta) = f(\xi)g(\eta) \tag{18}$$

と書くことができます。代入して整理しますと、

$$\begin{cases} \left[\dfrac{d}{d\xi}\xi\dfrac{d}{d\xi}+\dfrac{1}{4}k^2\xi-\tilde{\nu}_1\right]f(\xi) = 0 & \text{(19a)} \\ \left[\dfrac{d}{d\eta}\eta\dfrac{d}{d\eta}+\dfrac{1}{4}k^2\eta-\tilde{\nu}_2\right]g(\eta) = 0 & \text{(19b)} \\ \tilde{\nu}_1+\tilde{\nu}_2 = \gamma k & \text{(19c)} \end{cases}$$

[1]本稿ではこのように放物座標系を定義します。実は、人によって定義がことなり、ξ と η を逆にとる座標系もあります。

[2]球対称のポテンシャルは、z 軸から入射する波にとって特定の x, y 方向だけポテンシャルが低いとか、そういうことがあるわけではないので ϕ 依存性がないです。

[3]場合によって $\psi_c(\xi,\eta)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ と定数が掛けられますが、これは規格化定数の問題なので今は考えないで省略します。[1] では定数をつけていないのでこれに従います。

を得ます。ここで、

$$\gamma \equiv \frac{U_0}{2k} = \frac{q_A q_B}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{\hbar\nu} = \frac{q_A q_B}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\mu}{\hbar^2 k} \tag{20}$$

と置きました。γ は Sommerfeld parameter と呼ばれる無次元量で、系にとって低エネルギー散乱かどうかを特徴づけたりする量です。また $\nu = \frac{\hbar k}{\mu}$ は 2 粒子間の相対速度を表しています。

では、Eq. (19) を解いていきましょう。解くためには境界条件 Eq. (10) を考えます。今、入射粒子は波数 k を持って $z \to -\infty$ から平面波 e^{ikz} としてやって来ることを考えています。この条件を放物座標系で考えると

$$\psi_c(\mathbf{r})|_{z\to-\infty} = e^{ikz} \tag{21a}$$

$$= \exp\left(\frac{1}{2}ik(\xi-\eta)\right) \tag{21b}$$

と書けます。今、$\xi, \eta \geq 0$ なので、$z \to -\infty$ を表現するのは、$\eta \to \infty$ の領域しかありません。つまり、$z \to -\infty$ は $\eta \to \infty$ に対応します。ただし ξ については制限がありません。つまり、Eq. (21b) を解釈すると、η 方向の関数 $g(\eta)$ は $\eta \to \infty$ で $e^{-ik\eta/2}$ の形を持たなくてはならず、ξ 方向の関数 $f(\xi)$ は ξ の至るところで $e^{ik\xi/2}$ の形を持たなければなりません。

よって、境界条件の考察から

$$f(\xi) = e^{ik\xi/2} \tag{22}$$

であると考えられます。解が Eq. (22) であるとして Eq. (19a) に代入してみましょう。Eq. (19a) のなかで、分離定数だけがまだ未定ですので、これを導いてみましょう。すると、

$$\left[\frac{d}{d\xi}\xi\frac{d}{d\xi} + \frac{1}{4}k^2\xi - \tilde{\nu}_1\right]e^{ik\xi/2} = 0 \tag{23a}$$

$$\left(\frac{1}{2}ik - \tilde{\nu}_1\right)e^{ik\xi/2} = 0 \tag{23b}$$

となります。Eq. (23b) は ξ に依らずいつも成立していなければならないため、() ないがゼロとなります。よって分離定数 $\tilde{\nu}_1$ は

$$\tilde{\nu}_1 = \frac{1}{2}ik \tag{24}$$

でなければなりません。$\tilde{\nu}_1$ が分かったので、Eq. (19c) よりもう一つの分離定数 $\tilde{\nu}_2$ も

$$\tilde{\nu}_2 = \gamma k - \tilde{\nu}_1 \tag{25a}$$

$$= \gamma k - \frac{1}{2}ik \tag{25b}$$

と判明します。

最後に η 方向の微分方程式 Eq. (19b) を解きましょう。η 方向は $\eta\to-\infty$ で $e^{-ik\eta/2}$ の形を持たなければならないため、分かっている部分をあらわに書いて

$$g(\eta)=h(\eta)e^{-ik\eta/2} \tag{26}$$

の形だと仮定し、$h(\eta)$ について解いていきます。Eq. (19b) に代入して $h(\eta)$ について微分方程式を考えると

$$\left[\frac{d}{d\eta}\eta\frac{d}{d\eta}+\frac{1}{4}k^2\eta-\tilde{\nu}_2\right]\cdot\left\{h(\eta)e^{-ik\eta/2}\right\}=0 \tag{27}$$

より

$$e^{-ik\eta/2}\left[\eta\frac{d^2h(\eta)}{d\eta^2}+(1-ik\eta)\frac{dh(\eta)}{d\eta}-\gamma kh(\eta)\right]=0 \tag{28}$$

となりますが、いかなる η についても成立しなければならないため、

$$\left[\eta\frac{d^2}{d\eta^2}+(1-ik\eta)\frac{d}{d\eta}-\gamma k\right]h(\eta)=0 \tag{29}$$

が成立していなければなりません。これが解ければ、Eq. (26) に代入して $g(\eta)$ を解くことができます。

Eq. (29) の形を持つ微分方程式は、Kummer-Laplace の微分方程式として知られ、その解は合流型超幾何関数 (Confluent hypergeometric function) と呼ばれます。Eq. (29) は二階偏微分方程式なので、２つの独立な式が現れ、一般解はその２式の線形結合で書くことができます。その２つの独立な式の例として『原点正則な解』と『原点非正則な解』の２つが選ばれます。物理学で興味がある解は、関数が発散しない『原点正則な解』です。合流型超幾何関数の中の原点正則な解は $M(a,b,z)$ と書かれ、

$$h(\eta)=cM(-i\gamma,1,ik\eta) \tag{30}$$

です ($M(a,b,0)=1$)[4]。ここで、c は規格化定数です。これで $h(\eta)$ が求まりました。

以上から、散乱解 Eq. (13) は、Eq. (18) と Eq. (26), Eq. (30) より

$$\begin{aligned}\psi_c(\mathbf{r}) &= \psi_c(\xi,\eta) &(31a)\\ &= ce^{ik\xi/2}e^{-ik\eta/2}M(-i\gamma,1,ik\eta) &(31b)\\ &= ce^{ikz}M(-i\gamma,1,ik\eta) &(31c)\end{aligned}$$

となります。さて、規格化定数の c を決めましょう。規格化の方法は何種類かありますが、ここでは Eq. (10) で決まるように、入射波が

$$\psi_c(\mathbf{r})|_{z\to-\infty}=e^{ikz} \tag{32}$$

[4]原点非正則な解は $U(a,b,z)$ の形で書かれます。基本的に、合流型超幾何関数は特別な引数の時以外は、解析的な関数で記述されません。しかし、漸近形や原点付近の振る舞いは研究され明らかになっています。

となるように、漸近において入射波の指数関数にかかる係数が 1 になるように c を決めます。つまり、Eq. (31c) の漸近系を求め、その漸近系で e^{ikz} を含む項が現れるはずなので、その係数を Eq. (32) となるように決定します。

3　散乱状態の漸近形

3.1　なぜ漸近形が重要？

さて、散乱状態 $\psi_c(\mathbf{r})$ の漸近形が物理学では興味を持たれます。なぜ漸近形が重要なのか説明しましょう。今はクーロンポテンシャルであり、解は Eq. (31c) として全領域で解けてしまう数少ない問題です。一般的には原子核周辺ではクーロンポテンシャルではなく、非常に遠い領域のみでクーロンポテンシャルと見なせる場合が多いです。散乱した結果を観測するためには、基本的に原子核の大きさよりも十分離れた距離で見るため、その領域ではクーロンポテンシャル下の微分方程式の線形結合となります。なので漸近形が重要なのです。

3.2　漸近形の導出

話を戻しまして係数 c を求めましょう。そのためには、合流型超幾何関数 $M(a,b,z)$ の漸近形を知る必要があります。漸近形は [3]Eq. (13.5.1) より、

$$M(a,b,z)\Big|_{|z|\to\infty} = \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-a)}e^{i\pi a}z^{-a}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(a)_n(1+a-b)_n}{n!}(-z)^{-n} + \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)}e^z z^{a-b}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(b-a)_n(1-a)_n}{n!}z^{-n} \tag{33}$$
$$(-\pi/2 < \arg(z) < 3\pi/2)$$

と書けます。ここで、$(a)_n$ はポッホハマーの記号で、[3] の Eq. (6.1.22) より

$$(a)_n = a(a+1)(a+2)\cdots(a+n-1) = \frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(a)},\quad (a)_0 = 1 \tag{34}$$

という記号です。

特に $M(-i\gamma,1,ik\eta)$ の場合、$\arg(ik\eta)=\pi/2$ なので Eq. (33) が利用できて

$$M(-i\gamma,1,ik\eta)\Big|_{\eta\to\infty}$$
$$= \frac{\Gamma(1)}{\Gamma(1+i\gamma)}e^{\pi\gamma}(ik\eta)^{i\gamma}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-i\gamma)_n(-i\gamma)_n}{n!}(-ik\eta)^{-n} + \frac{\Gamma(1)}{\Gamma(-i\gamma)}e^{ik\eta}(ik\eta)^{-i\gamma-1}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(1+i\gamma)_n(1+i\gamma)_n}{n!}(ik\eta)^{-n} \tag{35a}$$
$$= \frac{e^{\pi\gamma}}{\Gamma(1+i\gamma)}(ik\eta)^{i\gamma}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\{(-i\gamma)_n\}^2}{n!}(-ik\eta)^{-n} + \frac{e^{ik\eta}}{\Gamma(-i\gamma)}(ik\eta)^{-i\gamma}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\{(1+i\gamma)_n\}^2}{n!}(ik\eta)^{-n-1} \tag{35b}$$

となります。今、波の形で ψ_c を記述したいので、複素数の関係式

$$z^c = \exp(c\ln z) = \exp\{c(\ln|z| + i\arg z)\} \tag{36}$$

を用いると

$$(ik\eta)^{i\gamma} = \exp\left[i\gamma\left\{\ln(k\eta) + i\frac{\pi}{2}\right\}\right] \tag{37}$$
$$(ik\eta)^{-i\gamma} = \exp\left[-i\gamma\left\{\ln(k\eta) + i\frac{\pi}{2}\right\}\right] \tag{38}$$

となります。ここで、$k>0,\eta>0$ の事実を用いています。変形を続けると

$$
\begin{aligned}
&M(-i\gamma,1,ik\eta)\Big|_{\eta\to\infty}\\
&=\frac{e^{\pi\gamma/2}}{\Gamma(1+i\gamma)}\exp\big[i\gamma\ln(k\eta)\big]\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\{(-i\gamma)_n\}^2}{n!}(-ik\eta)^{-n}+\frac{e^{\pi\gamma/2}e^{ik\eta}}{\Gamma(-i\gamma)}\exp\big[-i\gamma\ln(k\eta)\big]\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\{(1+i\gamma)_n\}^2}{n!}(ik\eta)^{-n-1} \quad (39)\\
&=\frac{e^{\pi\gamma/2}}{\Gamma(1+i\gamma)}\exp\big[i\gamma\ln(k\eta)\big]\left[1+\frac{\gamma^2}{ik\eta}+O((k\eta)^{-2})\right]+\frac{e^{\pi\gamma/2}}{\Gamma(-i\gamma)}\exp\big[ik\eta-i\gamma\ln(k\eta)\big]\frac{1}{ik\eta}\left[1+\frac{(1+i\gamma)^2}{ik\eta}+O((k\eta)^{-2})\right] \quad (40)
\end{aligned}
$$

となります。Eq. (40) を Eq. (31c) に代入し、$\eta\to\infty$ を考えれば、

$$
\begin{aligned}
\psi_c(\mathbf{r})|_{\eta\to\infty} \;=\; & c\frac{e^{\pi\gamma/2}}{\Gamma(1+i\gamma)}\exp\big[ikz+i\gamma\ln(k\eta)\big]\left[1+\frac{\gamma^2}{ik\eta}+O((k\eta)^{-2})\right]\\
&+c\frac{e^{\pi\gamma/2}}{\Gamma(-i\gamma)}\exp\big[ik(z+\eta)-i\gamma\ln(k\eta)\big]\frac{1}{ik\eta}\left[1+\frac{(1+i\gamma)^2}{ik\eta}+O((k\eta)^{-2})\right] \quad (41)
\end{aligned}
$$

となります。通常、第二項の中括弧内のオーダーは、第二項の係数にかかっている η^{-1} を考えて第一項と揃えて $O((k\eta)^{-1})$ までで良いですが、ついでなので書いて進めます。

入射波と球面波の表現にするため, $\eta=r-z=r(1-\cos\theta)=2r\sin^2\frac{\theta}{2}$ を用いると

$$
\begin{aligned}
\psi_c(\mathbf{r})\Big|_{r-z\to\infty} \;=\; & c\frac{e^{\pi\gamma/2}}{\Gamma(1+i\gamma)}\exp\big[ikz+i\gamma\ln\{kr(1-\cos\theta)\}\big]\left[1+\frac{\gamma^2}{ikr(1-\cos\theta)}+\cdots\right]\\
&+c\frac{e^{\pi\gamma/2}}{\Gamma(-i\gamma)}\exp\left(ikr-i\gamma\left[\ln(2kr)+\ln\sin^2\frac{\theta}{2}\right]\right)\frac{1}{2ikr\sin^2\frac{\theta}{2}}\left[1+\frac{(1+i\gamma)^2}{ikr(1-\cos\theta)}+\cdots\right] \quad (42)
\end{aligned}
$$

です。Eq. (42) の第一項は平面波、第二項は球面波を表していることが分かります (指数関数の中身の対数を含む部分を消すと明らかになります)。規格化として、入射波の指数関数の係数を 1 にするようにすれば、

$$
c\frac{e^{\pi\gamma/2}}{\Gamma(1+i\gamma)}=1,\quad\to\quad c=e^{-\pi\gamma/2}\Gamma(1+i\gamma) \quad (43)
$$

と決めればよい、と分かります。このように c を決めて、再度漸近形を求めていきます。

$$
\begin{aligned}
\psi_c(\mathbf{r})\Big|_{r-z\to\infty} \;=\; & \exp\big[ikz+i\gamma\ln\{kr(1-\cos\theta)\}\big]\left[1+\frac{\gamma^2}{ikr(1-\cos\theta)}+\cdots\right]\\
&+\frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(-i\gamma)}\frac{1}{2ik\sin^2\frac{\theta}{2}}\exp\left(-i\gamma\ln\sin^2\frac{\theta}{2}\right)\frac{\exp\left[ikr-i\gamma\ln(2kr)\right]}{r}\left[1+\frac{(1+i\gamma)^2}{ikr(1-\cos\theta)}+\cdots\right] \quad (44)
\end{aligned}
$$

$\Gamma(1+z)=z\Gamma(z)$ より $\Gamma(-i\gamma)=\frac{\Gamma(1-i\gamma)}{-i\gamma}$ の関係式を用いて

$$
\begin{aligned}
=\; & \exp\big[ikz+i\gamma\ln\{kr(1-\cos\theta)\}\big]\left[1+\frac{\gamma^2}{ikr(1-\cos\theta)}+\cdots\right]\\
&+\frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)}\frac{-\gamma}{2k\sin^2\frac{\theta}{2}}\exp\left(-i\gamma\ln\sin^2\frac{\theta}{2}\right)\frac{\exp\left[ikr-i\gamma\ln(2kr)\right]}{r}\left[1+\frac{(1+i\gamma)^2}{ikr(1-\cos\theta)}+\cdots\right] \quad (45)
\end{aligned}
$$

ここで、

$$
f(k,\theta)\equiv\frac{-\gamma}{2k\sin^2\frac{\theta}{2}}\exp\left[-i\gamma\ln\left(\sin^2\frac{\theta}{2}\right)\right]\frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)} \quad (46)
$$

を定義して

$$\psi_c(\mathbf{r})\Big|_{r-z\to\infty} = \exp\big[ikz + i\gamma\ln\{kr(1-\cos\theta)\}\big]\left[1+\frac{\gamma^2}{ikr(1-\cos\theta)}+\cdots\right] + f(k,\theta)\frac{\exp\left[ikr - i\gamma\ln(2kr)\right]}{r}\left[1+\frac{(1+i\gamma)^2}{ikr(1-\cos\theta)}+\cdots\right] \tag{47}$$

を得ます。漸近でのオーダーを揃えて、

$$\psi_c(\mathbf{r})\Big|_{r-z\to\infty} = \exp\big[ikz + i\gamma\ln\{kr(1-\cos\theta)\}\big]\left[1+\frac{\gamma^2}{ikr(1-\cos\theta)}+\cdots\right] + f(k,\theta)\frac{\exp\left[ikr - i\gamma\ln(2kr)\right]}{r} \tag{48}$$

とする方が良いかもしれません。ここまでで導出は終わりです。

少し補足していきましょう。Eq. (46) は、散乱問題を扱う人にとって非常に重要な、クーロン散乱振幅 (Coulomb-scattering amplitude) と呼ばれる量です。これは、どのくらいの速度 k で入射し、どの方向 θ に反射する時にどのくらい散乱するか? という量を表しています。$\theta \to 0, \pi$ で発散してしまうのが特徴です。

Eq. (47) の 1 行目、2 行目に中に含まれる指数関数内の対数と、そのあとの [ ] 内の 1 以外をとりあえず無視すると、1, 2 行目はそれぞれ $e^{ikz}, \frac{e^{ikr}}{r}$ になり、z 軸正の向きに進む平面波、外向きの球面波を表していそうなことが分かります。しかし、指数関数の中身は対数の発散であるため、どれだけ離れたとしても完全な平面波として記述することができません。

平面波として記述出来ないにしても、非常に大きい $\eta = r - z$ に対して、クーロンポテンシャルによる影響は波動関数の位相に対してのみ影響します ($\gamma\ln(kr(1-\cos\theta))$ が全て実関数であるためです)。つまり、第一項の波形が歪んでいるとはいっても、位相だけなので、絶対値をとれば消えてしまいます。流束 (確率の流れ)$\mathbf{j}(\mathbf{r})$ を計算すれば、単なる平面波の結果と同じとなります。

4 次回

クーロンの波動関数で、流束に関する話については次回にします。それまでは、[5][4] を見ると良いでしょう。微分断面積 (differential cross-section) やガモア因子 (Gamor factor) など重要な事柄についてお話しようかと思います。

Reference

[1] B. H. Bransden and C. J. Joachain, *Physics of Atoms and Molecules* , (2nd Edition), Addison-Wesley(2003).

[2] 石川健三著, 『量子力学』 11.7.2 項 放物線座標におけるシュレーディンガー方程式, https://www.sci.hokudai.ac.jp/~ishikawa/ryoushirikigaku4.pdf (平成27年) この資料では放物座標系の ξ と η が本稿のものと逆になっています。

[3] M. Abramowitz and I. A. Stegun (editors), *Handbook of Mathematical Functions*, https://personal.math.ubc.ca/~cbm/aands/toc.htm

[4] 武藤一雄著, 第 25 章 クーロン散乱, http://www.th.phys.titech.ac.jp/~muto/ http://www.th.phys.titech.ac.jp/~muto/lectures/QMII11/QMII11_chap25.pdf

[5] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics (Non-relativistic Theory)*, (Pergamon Press, Oxford, 1977).