

付録 D 散乱理論

D.1 リップマン・シュウィンガー方程式

二粒子間のポテンシャルが、互いの相対位置 $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ のみに依存する異種粒子間の二体衝突を考える (D.5 で同種粒子の場合を議論する). そのポテンシャルを $U = U(\mathbf{r})$ 、粒子の質量は共に m とする. 一方の粒子から見た、もう片方の粒子の状態ベクトル $|\psi\rangle$ は、以下のシュレーディンガー方程式の解である:

$$[H_0 + U]|\psi\rangle = E|\psi\rangle . \quad (\text{D.1})$$

ここで、 H_0 は、自由粒子のハミルトニアン

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 \quad (\text{D.2})$$

で、 μ は換算質量

$$\mu = \frac{mm}{m+m} = \frac{m}{2} \quad (\text{D.3})$$

である.

式 (D.1) において、 $U = 0$ のとき、つまり自由粒子の場合の解 (固有ベクトル) を $|\phi\rangle$ とする. これは、以下のように波数ベクトル \mathbf{k} の入射平面波を表すとする:

$$\langle \mathbf{r} | \phi \rangle \equiv \phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} . \quad (\text{D.4})$$

ここで、式 (D.1) の解 $|\psi\rangle$ を (入射波) + (散乱波) という形で表現することにする、つまり $|\psi\rangle = |\phi\rangle + X$ とする. 以下のように X を置けば、 $|\psi\rangle$ は式 (D.1) を満足することがわかる:

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_0} U |\psi\rangle . \quad (\text{D.5})$$

この式は、両辺に $|\psi\rangle$ が入っているため、 $|\psi\rangle$ に関するケット方程式である. 後の計算 (留数積分) を可能にするため、以下のようにエネルギーをわずかに複素数にする:

$$|\psi^{(\pm)}\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E \pm i\varepsilon - H_0} U |\psi^{(\pm)}\rangle . \quad (\text{D.6})$$

ここで、 ε は無限小の数とする . この方程式は、**リップマン・シュウィンガー方程式**と呼ばれる . 後ほど、 $|\psi^{(+)}\rangle$ のみが意味のある解であることがわかる .

式 (D.6) の両辺に、左から $\langle \mathbf{r} |$ をかけると、波動関数 $\langle \mathbf{r} | \psi^{(\pm)} \rangle \equiv \psi^{(\pm)}(\mathbf{r})$ に関する積分方程式が得られる :

$$\psi^{(\pm)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \int d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r} | \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | U | \psi^{(\pm)} \rangle . \quad (\text{D.7})$$

式 (D.7) の右辺の積分を計算する . まず、 $\langle \mathbf{r} | \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} | \mathbf{r}' \rangle$ は、

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} | \mathbf{r}' \rangle &= \iint d\mathbf{p}' d\mathbf{p}'' \langle \mathbf{r} | \mathbf{p}' \rangle \langle \mathbf{p}'' | \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} | \mathbf{p}'' \rangle \langle \mathbf{p}'' | \mathbf{r}' \rangle \\ &= \iint d\mathbf{p}' d\mathbf{p}'' \frac{\exp(i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}/\hbar)}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \frac{\delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}'')}{E - (p'^2/2\mu) \pm i\varepsilon} \frac{\exp(-i\mathbf{p}''\cdot\mathbf{r}'/\hbar)}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p}' \frac{\exp[i\mathbf{p}'\cdot(\mathbf{r} - \mathbf{r}')/\hbar]}{E - (p'^2/2\mu) \pm i\varepsilon} . \end{aligned}$$

ここで、 E とは入射波のエネルギーなので、入射波の波数ベクトル \mathbf{k} の大きさを k として、 $\hbar^2 k^2 / 2\mu$ と書く . また、運動量ベクトル \mathbf{p}' を、波数ベクトル $\mathbf{k}' \equiv \mathbf{p}'/\hbar$ で表すことにする . \mathbf{k}' に関する積分を、 \mathbf{k}' と $(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ のなす角を θ とする極座標で実行すると、

$$\begin{aligned} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p}' \frac{\exp[i\mathbf{p}'\cdot(\mathbf{r} - \mathbf{r}')/\hbar]}{E - (p'^2/2\mu) \pm i\varepsilon} &= \frac{2\mu}{(2\pi)^3 \hbar^2} \int_0^\infty dk' k'^2 \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin\theta \frac{\exp[ik'|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|\cos\theta]}{k^2 - k'^2 \pm i\varepsilon'} \\ &= \frac{2\mu}{(2\pi)^2 \hbar^2} \int_0^\infty dk' k'^2 \int_{-1}^{+1} d(\cos\theta) \frac{\exp[ik'|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|\cos\theta]}{k^2 - k'^2 \pm i\varepsilon'} \\ &= \frac{2\mu}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{i|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \int_0^\infty dk' k' \frac{\exp[ik'|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|] - \exp[-ik'|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|]}{k'^2 - k^2 \mp i\varepsilon'} \\ &= -\frac{2\mu}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{i|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \int_{-\infty}^\infty dk' \frac{k' \exp[ik'|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|]}{(k' + k\sqrt{1 \pm i\varepsilon'/k^2})(k' - k\sqrt{1 \pm i\varepsilon'/k^2})} \\ &= -\frac{2\mu}{4\pi\hbar^2} \frac{\exp[\pm ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|]}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} . \end{aligned} \quad (\text{D.8})$$

次に、 $\langle \mathbf{r}' | U | \psi^{(\pm)} \rangle$ を計算する． U が位置演算子のみの関数であるので、

$$\langle \mathbf{r}' | U | \mathbf{r}'' \rangle = U(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \quad (\text{D.9})$$

が成り立つことに注意して、

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}' | U | \psi^{(\pm)} \rangle &= \int d\mathbf{r}'' \langle \mathbf{r}' | U | \mathbf{r}'' \rangle \langle \mathbf{r}'' | \psi^{(\pm)} \rangle \\ &= \int d\mathbf{r}'' U(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \psi^{(\pm)}(\mathbf{r}'') \\ &= U(\mathbf{r}') \psi^{(\pm)}(\mathbf{r}') \quad . \end{aligned} \quad (\text{D.10})$$

以上の結果をまとめると、

$$\psi^{(\pm)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{2\mu}{\hbar^2} \int d\mathbf{r}' \frac{\exp[\pm ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|]}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') \psi^{(\pm)}(\mathbf{r}') \quad . \quad (\text{D.11})$$

この $\psi^{(\pm)}(\mathbf{r})$ に関する積分方程式のことを、リップマン・シュウィンガー方程式と呼ぶこともある．式 (D.11) から、散乱波は、散乱体の各点 \mathbf{r}' を中心とする球面波

$$G_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (\text{D.12})$$

を、 $(2\mu/\hbar^2)V(\mathbf{r}')\psi^{(\pm)}(\mathbf{r}')$ という因子を付けて、散乱体全体にわたり足し合わせたもの、と解釈できる ($G_{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ はグリーン関数と呼ばれる)．実際の散乱過程では、散乱波は散乱体から外向きに進行するので、 $G_{+}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ のみが現実的に意味がある．そこで、今後は、式 (D.11) の解として、 $\psi^{(+)}(\mathbf{r}')$ のみを考えることにする．

式 (D.11) 右辺の \mathbf{r}' に関する積分は、 $U(\mathbf{r}')$ が有意義な値をもつ範囲内だけで行えばよい．今、そのような範囲からずっと離れた位置 \mathbf{r} での波動関数の挙動を考える．つまり、 $|\mathbf{r}| \gg |\mathbf{r}'|$ とする．このとき、 $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \cong r - \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{r}'$ ($r \equiv |\mathbf{r}|$, $\hat{\mathbf{r}} \equiv \mathbf{r}/r$) と近似できるので、 $G_{+}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ は、

$$G_{+}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cong -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} e^{-ik'\cdot\mathbf{r}'} \quad (\text{D.13})$$

と近似できる．ここで、 $\mathbf{k}' \equiv k\hat{\mathbf{r}}$ と定義した．この近似式を、式 (D.11) に代入すると、

$$\begin{aligned}\psi^{(+)}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{2\mu}{4\pi\hbar^2} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{r} \int d\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') \psi^{(+)}(\mathbf{r}') \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{r} f(\mathbf{k}') \right]\end{aligned}\quad (\text{D.14})$$

ただし、

$$f(\mathbf{k}') = -\frac{2\mu}{4\pi\hbar^2} (2\pi)^3 \int d\mathbf{r}' \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') \psi^{(+)}(\mathbf{r}') . \quad (\text{D.15})$$

微分断面積 $d\sigma/d\Omega$ は、入射する粒子数に対する微小立体角要素 $d\Omega$ へ散乱される粒子数の比で定義される。それは、入射波と、 $r=1$ における散乱波の波動関数の絶対値の自乗(粒子の存在確率)の比であるので、

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\mathbf{k}')|^2 \quad (\text{D.16})$$

でと表される。よって、 $f(\mathbf{k}')$ は、散乱振幅と呼ばれる。全断面積 σ は、散乱振幅の絶対値の自乗を全立体角にわたって積分すると求まる：

$$\sigma = \int |f(\mathbf{k}')|^2 d\Omega . \quad (\text{D.17})$$

D.2 ボルン近似

式 (D.15) の $f(\mathbf{k}')$ には、依然、未知の波動関数 $\psi^{(+)}(\mathbf{r}')$ が含まれているので、このままでは微分断面積を計算できない。そこで、入射波の振幅に対して、散乱波の振幅が十分小さいと仮定し、 $f(\mathbf{k}')$ の積分の中に現れる $\psi^{(+)}(\mathbf{r}')$ を、入射波の波動関数で置きかえる近似をする：

$$\begin{aligned}f(\mathbf{k}') &\cong -\frac{2\mu}{4\pi\hbar^2} (2\pi)^3 \int d\mathbf{r}' \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} \\ &= -\frac{2\mu}{4\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r}' e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') .\end{aligned}\quad (\text{D.18})$$

これは、**ボルン近似**と呼ばれる。式 (D.18) より、 \mathbf{k}' 方向への散乱振幅は、散乱ポテンシャル $U(\mathbf{r}')$ の、粒子の運動量変化 $\Delta\mathbf{k} \equiv \mathbf{k}'-\mathbf{k}$ に関するフーリエ変換に比例することがわかる。

散乱ポテンシャル $U(\mathbf{r}')$ の広がり、入射波の波長に比べて無視できるほど小さいとする (この状況は、後に説明する S 波散乱の場合に対応する)。このとき、 $e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}'} \cong 1$ と近似できるので、

$$f(\mathbf{k}') \cong -\frac{2\mu}{4\pi\hbar^2} U_0 \quad (\text{D.19})$$

ただし、

$$U_0 = \int d\mathbf{r}' U(\mathbf{r}') \quad (\text{D.20})$$

となる。つまり、散乱振幅は散乱方向に依存しなくなる。しかも、ポテンシャルの具体的な形状には依らず、単にポテンシャルの空間積分 U_0 (付録 C の式 (C.31) の U_0 と同じものである) に比例する。

D.3 散乱振幅の部分波表現

波数ベクトル \mathbf{k} の入射平面波は、以下のようにルジャンドル多項式 $P_l(\cos\theta)$ * によって級数展開できる：

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos\theta) . \quad (\text{D.21})$$

ここで、 θ は \mathbf{k} と \mathbf{r} のなす角である。 j_l は l 次の球ベッセル関数で、 $u_l(r) = r \cdot j_l(kr)$ は、波動関数の動径部分に関する自由粒子のシュレーディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{d}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_l(r) = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} u_l(r) \quad (\text{D.22})$$

の解である。 $j_l(kr)$ は、 r が大きいとき、

$$j_l(kr) \cong \frac{1}{kr} \sin(kr - l\pi/2) = \frac{1}{2ik} \left[\frac{e^{i(kr-l\pi/2)}}{r} - \frac{e^{-i(kr-l\pi/2)}}{r} \right] \quad (\text{D.23})$$

と近似できる。

散乱ポテンシャル $U(\mathbf{r})$ が球対称の場合、確率振幅 $f(\mathbf{k}')$ は \mathbf{k} (入射方向) と \mathbf{k}' (散乱

* $P_l(\cos\theta) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \frac{d^l (1-\cos^2\theta)^l}{d(\cos\theta)^l}$

方向)のなす角 θ にのみ依存するので、以下のようにルジャンドル多項式による級数展開ができる：

$$f(\mathbf{k}') \equiv f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l P_l(\cos \theta) . \quad (\text{D.24})$$

f_l は、**部分波振幅**と呼ばれる．各 f_l を定める処方は後に説明する．

式 (D.21) (D.24) より、式 (D.14) によって表される $\psi^{(+)}(\mathbf{r})$ も、以下のようにルジャンドル多項式で級数展開できる：

$$\psi^{(+)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l \frac{1}{2ik} \left[(1+2ikf_l) \frac{e^{i(kr-l\pi/2)}}{r} - \frac{e^{-i(kr-l\pi/2)}}{r} \right] P_l(\cos \theta) \quad (\text{D.25})$$

このように、 $\psi^{(+)}(\mathbf{r})$ は、それぞれの l において、外向き球面波と内向き球面波の和に分解できる．粒子の湧き出しや吸い込みはないので、これらの振幅の大きさは同じでなくてはいけない．つまり、これらは位相のみが違ってよい．その位相差を $2\delta_l$ とすると、外向き球面波の係数 $(1+2ikf_l)$ は、

$$1+2ikf_l = e^{2i\delta_l} \quad (\text{D.26})$$

と表されなければならない．これを (D.25) に代入すると、

$$\begin{aligned} \psi^{(+)}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l \frac{1}{2ik} \left[e^{2i\delta_l} \frac{e^{i(kr-l\pi/2)}}{r} - \frac{e^{-i(kr-l\pi/2)}}{r} \right] P_l(\cos \theta) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l \frac{e^{i\delta_l}}{kr} \sin(kr-l\pi/2+\delta_l) P_l(\cos \theta) \end{aligned} \quad (\text{D.27})$$

となり、これは入射平面波の展開式 (D.21) の球ベッセル関数 $j_l(kr)$ の位相を δ^l だけシフトさせたものであることがわかる．つまり、球対称ポテンシャルの存在によって、動径方向の波動関数の位相 $u_l(r)$ が、以下のように δ^l だけシフトしたと解釈できる：

$$u_l(r) (= r j_l(kr)) \stackrel{r \gg 1}{\cong} \frac{1}{k} \sin(kr-l\pi/2) \xrightarrow{\text{位相差 } \delta_l} \frac{e^{i\delta_l}}{k} \sin(kr-l\pi/2+\delta_l) \quad (\text{D.28})$$

この位相シフトは、球対称ポテンシャル $U(r)$ がある場合の、波動関数の動径部分に関するシュレーディンガー方程式

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{d}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] + U(r) \right\} u_l(r) = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} u_l(r) \quad (\text{D.29})$$

(このとき、もはや $u_l(r) = r \cdot j_l(kr)$ ではない)を具体的に解き、ポテンシャルがない場合の解、つまり $r \cdot j_l(kr)$ と比較することにより求めることができる。位相差 δ_l が求まれば、部分波振幅は式(D.26)より

$$f_l = \frac{e^{i\delta_l} \sin \delta_l}{k} \quad (\text{D.30})$$

と表される。全散乱断面積 σ を計算すると、

$$\begin{aligned} \sigma &= \int |f(\theta)|^2 d\Omega \\ &= \frac{1}{k^2} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \sum_l \sum_{l'} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \sin \delta_l \sin \delta_{l'} P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l \end{aligned} \quad (\text{D.31})$$

となる。計算において、球面調和関数の直交性**を用いた。

D.4 S波散乱と散乱半径

式(D.29)より、 l 番目の動径波動関数 $u_l(r)$ に対する有効ポテンシャルは

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2} + U(r) \quad (\text{D.32})$$

となる。半古典的に考えると、入射エネルギー $-\frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$ の粒子は、 $r \approx \sqrt{l(l+1)} \lambda$ ($\lambda \equiv k^{-1}$)

** 球面調和関数 $Y_l^m(\theta, \phi) \equiv (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}$ は、次の直交関係を見たす：

$$\int Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi) Y_l^m(\theta, \phi) d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad .$$

までしか進入できない．今，散乱ポテンシャル $U(r)$ の到達範囲が入射波の波長 に比べて十分短い場合を考えると， $l \neq 0$ の動径波動関数 $u_l(r)$ は散乱ポテンシャルの存在をほとんど感じることができない．しかし， $l = 0$ の動径波動関数 $u_0(r)$ は，散乱ポテンシャルを感じることができるので，位相差 δ_0 が生じる．そして，結果的に全散乱断面積 σ に寄与するのは， $l = 0$ の散乱 (**S 波散乱**) だけになる：

$$\sigma = 4\pi \left(\frac{\sin \delta_0}{k} \right)^2 . \quad (\text{D.33})$$

散乱断面積を簡単に計算できる一つの例として，半径 R の剛体球による散乱を考える．波動関数は $r = R$ で必ずゼロになり， $r > R$ では自由空間のシュレーディンガー方程式 (D.22) に従う．よって，波動関数は，剛体球がない場合と比べ，単に原点が R だけずれたものになる：

$$u_0(r) \stackrel{r \text{ 大}}{\cong} \frac{1}{k} \sin(kr) \xrightarrow{\text{半径} R \text{ の剛体球}} \frac{1}{k} \sin(k(r-R)) = \frac{1}{k} \sin(kr + \delta_0) \quad (\text{D.34})$$

ただし，

$$\delta_0 = -kR . \quad (\text{D.35})$$

このように，位相差 δ_0 は，入射波の波長 $\lambda = 2\pi/k$ に対する R の比 (に 2π をかけたもの) になる．半径 R が入射波の波長 λ に比べて十分小さいとき (S 波散乱のとき)， $\delta_0 \ll 1$ が成り立ち，(D.33) の全散乱断面積は，

$$\sigma = 4\pi \lim_{\delta_0 \rightarrow 0} \left(\frac{\sin \delta_0}{k} \right)^2 = 4\pi \left(\frac{\delta_0}{k} \right)^2 = 4\pi R^2 \quad (\text{D.36})$$

となる．これは剛体の幾何学的断面積 πR^2 の 4 倍である．

ここで，剛体球による散乱のアナロジーで，S 波散乱による動径波動関数 $u_0(r)$ の位相のずれ δ_0 が，実効的に $u_0(r)$ の原点 ($u_0(r) = 0$ の点) をどれだけずらすか，を考える．位相差 δ_0 を持った動径波動関数 $u_0(r)$ は，式 (D.28) より，

$$u_0(r) \stackrel{r \text{ 大}}{\cong} e^{i\delta_0} \frac{\sin(kr + \delta_0)}{k} \quad (\text{D.37})$$

と表される．式 (D.37) の $k \rightarrow 0$ での極限 (低エネルギー極限) は，以下のようになる：

$$\begin{aligned} \lim_{k \rightarrow 0} e^{i\delta_l} \frac{\sin(kr + \delta_0)}{k} &= e^{i\delta_0} \cos \delta_0 \lim_{k \rightarrow 0} \left(\frac{\sin kr}{k} + \frac{\tan \delta_0}{k} \cos kr \right) \\ &= e^{i\delta_0} \cos \delta_0 \left(r + \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan \delta_0}{k} \right) \\ &= e^{i\delta_0} \cos \delta_0 (r - a) . \end{aligned} \quad (\text{D.38})$$

ここで，

$$a \equiv -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan \delta_0}{k} . \quad (\text{D.39})$$

と定義した．このように， $u_0(r)$ は $r = a$ を原点とする直線になる．この a を**散乱半径**または**散乱長**と呼ぶ．S 波散乱の散乱振幅 f_0 の $k \rightarrow 0$ での極限值は，散乱半径 a の符号を変えたものあることがわかる：

$$\lim_{k \rightarrow 0} f_0 = \lim_{k \rightarrow 0} \left(\frac{e^{i\delta_l} \sin \delta_0}{k} \right) = \lim_{k \rightarrow 0} \left(\frac{1}{k \cot \delta_0 - ik} \right) = -a . \quad (\text{D.40})$$

よって，全散乱断面積は，

$$\sigma = \int |f_0|^2 d\Omega = 4\pi a^2 \quad (\text{D.41})$$

と表される．これは剛体球の S 波散乱断面積 $\sigma = 4\pi R^2$ (D.36) と同じ形をしている．

ところで，D.2 の式 (D.19), (D.20) で，ポルン近似における散乱振幅 $f(\mathbf{k}')$ は，散乱ポテンシャル $U(\mathbf{r}')$ の広がりが入射波の波長に比べて無視できるほど小さいとき，つまり実効的に $k \rightarrow 0$ のとき，

$$f(\mathbf{k}') \stackrel{k \rightarrow 0}{\cong} -\frac{2\mu}{4\pi\hbar^2} U_0 \quad (\text{D.19})$$

ただし、

$$U_0 = \int d\mathbf{r}' U(\mathbf{r}') \quad (\text{D.20})$$

と表されることを示した（この式は剛体球には適応できない．なぜなら剛体球ではボルン近似が成り立たないからである．）．散乱振幅に関する二つの表現，式（D.19）と（D.40），は仮定している条件（ $k \rightarrow 0$ ）が同じなので，両者は一致するはずである：

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}') &\stackrel{k \rightarrow 0}{\cong} -\frac{2\mu}{4\pi\hbar^2} U_0 = \lim_{k \rightarrow 0} f_0 \quad (\text{D.41}) \\ \Leftrightarrow -\frac{2\mu}{4\pi\hbar^2} U_0 &= -a \end{aligned}$$

よって， U_0 と a の関係式

$$U_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \quad (\text{D.42})$$

が得られる．ここで，換算質量 μ と粒子の質量 m との関係式 $\mu = m/2$ （D.3）を用いた．式（D.42）は，ボルン近似が成り立つ範囲で正しい．斥力ポテンシャル（ $U_0 > 0$ ）では， $a > 0$ ，引力ポテンシャル（ $U_0 < 0$ ）では， $a < 0$ になる．

D.5 同種粒子間の散乱

これまでの議論は，すべて異種粒子間の二体衝突を考えてきた．同種粒子間の衝突を記述する波動関数は、粒子の交換に対して、ボース粒子の場合は対称、フェルミ粒子の場合は反対称でなければならない．これまで $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ と定義し，散乱状態の波動関数 $\psi^{(+)}(\mathbf{r}) = \psi^{(+)}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ を求めてきたが，粒子を交換すると， $\psi^{(+)}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) = \psi^{(+)}(-\mathbf{r})$ となり，粒子の交換に対して対称でも反対称でもない．正しい波動関数 $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ は，以下のよう形をとる：

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi^{(+)}(\mathbf{r}) \pm \psi^{(+)}(-\mathbf{r}) \quad (+ \text{ はボース粒子、} - \text{ はフェルミ粒子}). \quad (\text{D.43})$$

具体的に， $\psi^{(+)}$ の漸近形（D.14）を代入すると，

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi^{(+)}(\mathbf{r}) \pm \psi^{(+)}(-\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \pm e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + [f(\mathbf{k}') \pm f(-\mathbf{k}')] \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{r} \right]. \quad (\text{D.44})$$

このように、ある特定の k' 方向への散乱振幅は、粒子 1 が k' 方向に (粒子 2 が $-k'$ 方向に) 散乱される確率振幅と、粒子 2 が k' 方向に (粒子 1 が $-k'$ 方向に) 散乱される確率振幅の和 (ボース粒子) または差 (フェルミ粒子) になる。特に、S 波散乱の場合、 $f(k') = f(-k') = -a$ なので、粒子 1, 粒子 2 を区別しない衝突断面積 σ_{1+2} は、

$$\sigma_{1+2} = \begin{cases} 4\pi(-a-a)^2 = 16\pi a^2 & (\text{ボース粒子}) \\ 4\pi(-a+a)^2 = 0 & (\text{フェルミ粒子}) \end{cases} \quad (\text{D.45})$$

となる。注目すべきことは、フェルミ粒子間の S 波散乱は起こり得ないことである。また、ボース粒子の場合、一粒子当たりの散乱断面積 σ は、

$$\sigma = 8\pi a^2 \quad (\text{D.46})$$

となり、異種粒子間の散乱断面積の 2 倍になる。

今、温度 T 、密度 n のボース粒子の集団を考える。集団の速度分布がマックスウェル・ボルツマン分布をしているとすると、粒子間の相対速度の平均値 \bar{v} は、

$$\bar{v} = 4\sqrt{k_B T / \pi m} \quad (\text{D.47})$$

であり、単位時間当たりの平均衝突回数は、

$$n\sigma\bar{v} = 32\pi a^2 \sqrt{k_B T / \pi m} \quad (\text{D.48})$$

となる。モンテカルロシミュレーションによると、非平衡状態にある粒子集団が、平衡状態へ緩和 (熱化) するレート $1/\tau$ に対する、弾性衝突のレートは、2.7 である。つまり、熱化の時定数 τ の間に 2.7 回の衝突が起こる：

$$n\sigma\bar{v} = 2.7 / \tau \quad (\text{D.49})$$

この式を用いて、熱化の時定数から散乱半径 (またはその逆) を推定することができる。

