量子力学 III　第 3 回レポート問題　解答

第 1 問：Helmholtz 方程式の Green 関数

(1)　$\phi_k(\boldsymbol{x})$ を式 (1) の解とするとき，

$$(\nabla_{\boldsymbol{x}}^2 + k^2)\phi_k(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') = \delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \tag{i}$$

も成り立つことに注意する。ただし，$\nabla_{\boldsymbol{x}}$ は $\boldsymbol{x}$ に関する微分であることを強調した記法である。したがって，

$$\phi(\boldsymbol{x}) = \int \phi_k(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\rho(\boldsymbol{x}')d\boldsymbol{x}' \tag{ii}$$

とおけば，

$$\begin{aligned}(\nabla^2 + k^2)\phi(\boldsymbol{x}) &= \int (\nabla_{\boldsymbol{x}}^2 + k^2)\phi_k(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\rho(\boldsymbol{x}')d\boldsymbol{x}' \\ &= \int \delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\rho(\boldsymbol{x}')d\boldsymbol{x}' \\ &= \rho(\boldsymbol{x}) \end{aligned} \tag{iii}$$

となり，式 (2) の解であることが分かる。

(2)　$\tilde{\phi}_k(\boldsymbol{\xi})$ の Fourier 逆変換

$$\phi_k(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{\mathbb{R}^3} \tilde{\phi}_k(\boldsymbol{\xi})e^{i\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{x}}d\boldsymbol{\xi} \tag{iv}$$

を方程式 (1) に代入すると

$$\frac{1}{(2\pi)^3}\int (-\xi^2 + k^2)\tilde{\phi}_k(\boldsymbol{\xi})e^{i\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{x}}d\boldsymbol{\xi} = \delta(\boldsymbol{x}) \tag{v}$$

となる。ここで，$\xi = |\boldsymbol{\xi}|$ と書いた。デルタ関数が

$$\delta(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{i\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{x}}d\boldsymbol{\xi} \tag{vi}$$

と書けることに注意して，$e^{i\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{x}}$ の係数を比べると，

$$\tilde{\phi}_k(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{k^2 - \xi^2} \tag{vii}$$

を得る。

(3)　極座標系において，積分を行うと，

$$\frac{1}{(2\pi)^3}\int \tilde{\phi}_{k\pm i\epsilon}(\boldsymbol{\xi})d\boldsymbol{\xi} = \frac{2}{(2\pi)^2 x}\int_0^\infty \frac{\xi\sin\xi x}{(k\pm i\epsilon)^2 - \xi^2}d\xi = \frac{1}{(2\pi)^2}\int_{-\infty}^\infty \frac{\xi e^{i\xi x}}{(k\pm i\epsilon)^2 - \xi^2}d\xi \tag{viii}$$

となる。ただし，$x = |\boldsymbol{x}|$ と書いた。最右辺の非積分関数は，$\xi = k \pm i\epsilon$ と $\xi = -k \mp i\epsilon$ にそれぞれ一位の極をもっていることに注意すると，複素積分によって積分を実行できる（上半平面に積分路を付け加えよ：第 2 回レポートの第 2 問参照）。その結果，

$$\phi_k^\pm(\boldsymbol{x}) = -\frac{e^{\pm ikx}}{4\pi x} \tag{ix}$$

を得る。

(4) まず，

$$f(\boldsymbol{x}) = -\frac{1}{4\pi x} \tag{x}$$

が方程式

$$\nabla^2 f(\boldsymbol{x}) = \delta(\boldsymbol{x}) \tag{xi}$$

を満たすことに注意する。実際，$\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$ ならば，

$$\nabla^2 f(\boldsymbol{x}) = \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x}\frac{d}{dx}\right)\left(-\frac{1}{4\pi x}\right) = -\frac{1}{4\pi}\left(\frac{2}{x^3} - \frac{2}{x^3}\right) = 0 \tag{xii}$$

であり，B_ϵ を原点を中心とした半径 ϵ の球とすると，ガウスの定理によって，

$$\int_{B_\epsilon} \nabla^2 f(\boldsymbol{x}) d\boldsymbol{x} = -\frac{1}{4\pi}\int_{\partial B_\epsilon} \nabla\left(\frac{1}{x}\right)\cdot \boldsymbol{n} dS = -\frac{1}{4\pi}\left(-\frac{1}{\epsilon^2}\right)4\pi\epsilon^2 = 1 \tag{xiii}$$

となる。ただし，∂B_ϵ は球 B_ϵ の表面（原点を中心とした半径 ϵ の球面），$\boldsymbol{n}$ は球面状の外向き法線ベクトル，dS は球面状の面積要素である。このことに注意すると，

$$\nabla^2 \phi_k^\pm(\boldsymbol{x}) = \nabla^2\left(-\frac{1}{4\pi x}\right) + \frac{k^2 e^{\pm ikx}}{4\pi x} = \delta(\boldsymbol{x}) - k^2\phi_k^\pm(\boldsymbol{x}) \tag{xiv}$$

となり，確かに (1) の解となっていることが分かる。

第 2 問：Bessel 関数と平面波の展開

(1) 級数

$$y(z) = z^\rho \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n \tag{xv}$$

を Bessel の微分方程式 (5) に代入して，最低次 $z^{\rho-2}$ の係数を比べると，

$$(\rho(\rho-1) + \rho - \nu^2)c_0 = 0 \tag{xvi}$$

となるが，$c_0 \neq 0$ を仮定していたので，$\rho = \pm\nu$ を得る。

(2) 級数を Bessel の微分方程式 (5) に代入して，次数ごとに整理すると，

$$\begin{aligned}&(\rho^2 - \nu^2)c_0 z^{\rho-2} + ((\rho+1)^2 - \nu^2)c_1 z^{\rho-1} \\ &+ \sum_{n=2}^{\infty}\left[((\rho+n)^2 - \nu^2)c_n + c_{n-2}\right] z^{\rho+n-2} = 0\end{aligned} \tag{xvii}$$

となる。ここで，z の冪の係数が全てゼロになるように c_n が決まっていく。まず，$\rho \notin \frac{1}{2}\mathbb{Z}_{<0}$ の仮定により，$c_1 = 0$ が得られる。また，同じ仮定により，$n \geq 2$ に対して

$$c_n = -\frac{c_{n-2}}{n(2\rho + n)} \tag{xviii}$$

が成り立つ。

(3) まず，n が奇数のときに，$c_n = 0$ であることはすぐにわかる。$s \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ として，$n = 2s$ のとき，

$$c_{2s} = -\frac{c_{2(s-1)}}{2^2 s(\rho + s)} = \frac{(-1)^s}{2^{2s} s!(\rho + 1; s)} c_0 \tag{xix}$$

であることが分かる。ここで，$\alpha \in \mathbb{C}$ に対して，

$$(\alpha; s) := \alpha(\alpha + 1) \cdots (\alpha + s - 1) \tag{xx}$$

という記法を導入した。

(4) まず，$J_n(z)$ の最低次の振る舞いは

$$J_n(z) = \begin{cases} \frac{z^n}{2^n n!} + \cdots & n \geq 0, \\ (-1)^n \frac{z^{-n}}{2^{-n}(-n)!} & n < 0 \end{cases} \tag{xxi}$$

となっていることに注意する。展開式 (8) の両辺に $e^{-in\theta}$ をかけて θ について，0 から 2π まで積分すると，

$$\int_0^{2\pi} e^{-in\theta} e^{iz\cos\theta} d\theta = 2\pi A_n J_n(z) \tag{xxii}$$

となる。そこで，両辺で z についての最低次の係数を比べることで，A_n を決めることができる。まず，$n \geq 0$ のときを考える。このとき，式 (xxii) の左辺において z^n の項は

$$\frac{(iz)^n}{n!} \int_0^{2\pi} e^{-in\theta} \cos^n \theta d\theta = \frac{2\pi(iz)^n}{2^n n!} \tag{xxiii}$$

と計算されるので，$A_n = i^n$ であることが分かる。次に $n < 0$ のときを考える。このとき，式 (xxii) の左辺において，z^{-n} の項は

$$\frac{(iz)^{-n}}{(-n)!} \int_0^{2\pi} e^{-in\theta} \cos^{-n} \theta d\theta = \frac{2\pi(iz)^{-n}}{2^{-n}(-n)!} \tag{xxiv}$$

と計算されるので，やはり $A_n = i^n$ であることが分かる。

第 3 問：Born 近似による散乱振幅

まず，ポテンシャル $U(\boldsymbol{x})$ が球対称な場合に，$f_{\boldsymbol{k}}^{(1)}(\boldsymbol{k}')$ を書き直す。$\boldsymbol{K} = \boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'$ とおく。

$$\begin{aligned} f_{\boldsymbol{k}}^{(1)}(\boldsymbol{k}') &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{x}} U(\boldsymbol{x}) d\boldsymbol{x} \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty x^2 dx \int_{-1}^1 d(\cos\theta) \int_0^{2\pi} d\phi e^{iKx\cos\theta} U(x) \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2 K} \int_0^\infty x \sin(Kx) U(x) dx. \end{aligned} \tag{xxv}$$

ただし，$|\boldsymbol{K}| = K$，$U(\boldsymbol{x}) = U(|\boldsymbol{x}|) = U(x)$ と書いた。

(1)　積分の部分を計算する。

$$\begin{aligned}\int_0^\infty x\sin(Kx)U(x)dx &= U_0\int_0^a dx x\sin(Kx)\\ &= U_0\left(\frac{1}{K^2}\sin Ka - \frac{a}{K}\cos(Ka)\right).\end{aligned} \tag{xxvi}$$

したがって，散乱振幅は

$$f_{\boldsymbol{k}}^{(1)}(\boldsymbol{k}') = -\frac{2mU_0}{\hbar^2K^3}\left(\sin(Ka) - Ka\cos(Ka)\right) \tag{xxvii}$$

となる。

(2)　積分の部分を計算する。

$$\begin{aligned}\int_0^\infty x\sin(Kx)U(x)dx &= -\frac{U_0}{4}\frac{d}{dK}\int_{-\infty}^\infty (e^{iKz} + e^{-iKz})e^{-z^2/a^2}dz\\ &= -\frac{U_0 a\sqrt{\pi}}{2}\frac{d}{dK}\left(e^{-K^2a^2/4}\right)\\ &= \frac{U_0\sqrt{\pi}Ka^3}{4}e^{-K^2a^2/2}.\end{aligned} \tag{xxviii}$$

したがって，散乱振幅は

$$f_{\boldsymbol{k}}^{(1)}(\boldsymbol{k}') = -\frac{\sqrt{\pi}mU_0a^3}{2\hbar^2}e^{-K^2a^2/2} \tag{xxix}$$

となる。