

散乱でのグリーン関数

散乱の考え方そのものは非相対論的な場合と同じなので、まずはそれを見ておきます。シュレーディンガー方程式が時間依存するポテンシャルを含んでいるときの解を遅延グリーン関数から作ります。最初に、先進、遅延グリーン関数の話をしています。

先進、遅延グリーン関数の定義をします。先進グリーン関数を G^- 、遅延グリーン関数を G^+ とします。どちらの場合もシュレーディンガー方程式

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H})\psi(\mathbf{x}, t) = 0$$

に対応して

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H})G^\pm(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = \hbar\delta(t - t')\delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (1)$$

と定義されます。先進グリーン関数では $t < t'$ 、遅延グリーン関数では $t > t'$ のときに値を持ちます。 G を

$$G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = G^+(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') - G^-(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t')$$

とすれば

$$G^+(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = \begin{cases} G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') & \dots & t > t' \\ 0 & \dots & t < t' \end{cases}$$
$$G^-(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = \begin{cases} -G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') & \dots & t < t' \\ 0 & \dots & t > t' \end{cases}$$

ヘヴィサイド (Heaviside) の階段関数

$$\Theta(t) = \begin{cases} 1 & \dots & t > 0 \\ 0 & \dots & t < 0 \end{cases}$$

を使えば

$$G^+(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = \Theta(t - t')G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t'), \quad G^-(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = -\Theta(t' - t)G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t')$$

となります。

$G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t')$ を使うと波動関数は

$$\psi(\mathbf{x}, t) = i \int d^3x' G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') \psi(\mathbf{x}', t')$$

と書けます (量子力学での「シュレーディンガー方程式のグリーン関数」参照)。これは $t > t'$ なら遅延グリーン関数、 $t < t'$ なら先進グリーン関数になります。階段関数を使えば

$$\Theta(t - t') \psi(\mathbf{x}, t) = i \int d^3x' G^+(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') \psi(\mathbf{x}', t') \quad (2a)$$

$$\Theta(t' - t) \psi(\mathbf{x}, t) = -i \int d^3x' G^-(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') \psi(\mathbf{x}', t') \quad (2b)$$

となります。

先進、遅延グリーン関数が実際に (1) の解になることを確かめます。どちらでも同じなので遅延グリーン関数とします。(2a) に (1) の演算子部分を作用させると

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}) \Theta(t - t') \psi(\mathbf{x}, t) = i \int d^3x' (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}) G^+(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') \psi(\mathbf{x}', t') \quad (3)$$

左辺は、階段関数の微分 (下の補足で示してます)

$$\frac{d\Theta(\tau)}{d\tau} = \delta(\tau) \quad (4)$$

から

$$\begin{aligned} (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}) \Theta(t - t') \psi(\mathbf{x}, t) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Theta(t - t') \psi(\mathbf{x})) - \Theta(t - t') \hat{H} \psi(\mathbf{x}, t) \\ &= i\hbar \frac{\partial \Theta(t - t')}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) + i\hbar \Theta(t - t') \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) - \Theta(t - t') \hat{H} \psi(\mathbf{x}, t) \\ &= i\hbar \frac{\partial \Theta(t - t')}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) + \Theta(t - t') (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}) \psi(\mathbf{x}, t) \end{aligned}$$

第2項はシュレーディンガー方程式から0です。第1項には (4) を使うことで、(3) の左辺は

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}) \Theta(t - t') \psi(\mathbf{x}, t) = i\hbar \delta(t - t') \psi(\mathbf{x}, t) \quad (5)$$

(3) の右辺は、 G^+ が (1) を満たしているなら

$$\begin{aligned} i \int d^3x' (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}) G^+(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') \psi(\mathbf{x}', t') &= i\hbar \int d^3x' \delta(t - t') \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}', t') \\ &= i\hbar \delta(t - t') \psi(\mathbf{x}, t') \end{aligned}$$

となり、デルタ関数は $t = t'$ で値を持つので (5) と一致します。よって、遅延グリーン関数は (1) の解です。先進グリーン関数でも同様です。

グリーン関数のフーリエ変換を行います。ハミルトニアンが平行移動で不変になっているなら (並進不変)、対応するグリーン関数も平行移動で不変と考えられるので、グリーン関数を位置の差 $\mathbf{x} - \mathbf{x}'$ 、時間の差 $t - t'$ に依存しているとします。表記を簡単にするために、 $G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t')$ を $G(\mathbf{x}; \mathbf{x}')$ と書きます。位置と時間のフーリエ変換を

$$F(t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp_0 f(p_0) e^{-ip_0 t/\hbar}, \quad f(p_0) = \int_{-\infty}^{\infty} dt F(t) e^{ip_0 t/\hbar}$$

$$F(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p f(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar}, \quad f(\mathbf{p}) = \int d^3x f(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar}$$

と定義し、フーリエ変換の前後で記号を変えず変数で区別することにして

$$G(\mathbf{x}; \mathbf{x}') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi\hbar} \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} e^{-ip_0(t-t')/\hbar} e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')/\hbar} G(p) \quad (6)$$

$G(p_0, \mathbf{p})$ も $G(p)$ と表記しています。フーリエ変換できるのは、今のように並進不変性がある時です。

具体的に自由粒子としてフーリエ変換の計算を行っていきます。自由粒子でのシュレーディンガー方程式は

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2) \phi(\mathbf{x}, t) = 0$$

なので、先進、遅延グリーン関数 $G_0^\pm(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ は

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2) G_0^\pm(\mathbf{x}; \mathbf{x}') = \int \frac{d^4p}{(2\pi\hbar)^4} (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2) e^{-ip_0(t-t')/\hbar} e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')/\hbar} G_0^\pm(p)$$

$$= \int \frac{d^4p}{(2\pi\hbar)^4} (p_0 - \frac{\mathbf{p}^2}{2m}) e^{-ip_0(t-t')/\hbar} e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')/\hbar} G_0^\pm(p)$$

これから、 $p_0 \neq \mathbf{p}^2/2m$ として

$$G_0^\pm(p) = \frac{\hbar}{p_0 - \mathbf{p}^2/2m}$$

とすれば

$$\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi\hbar} e^{-ip_0(t-t')/\hbar} \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')/\hbar} = \hbar \delta(t-t') \delta^3(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$$

から、(1) になります。しかし、この形では (6) の積分が $p_0 = \mathbf{p}^2/2m$ となる地点で極を持ってしまいます (p_0 は $-\infty$ から $+\infty$ の積分なので、 p_0 の実軸上に極がある)。この極を

$$G_0^\pm(p) = \frac{\hbar}{p_0 - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \pm i\epsilon}$$

として避けることで先進、遅延グリーン関数になります。 ϵ は積分実行後に0に取ります。
 $+i\epsilon$ によって遅延グリーン関数になることを確かめます。 $G_0^+(p)$ を(6)に入れば

$$G_0^+(x; x') = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi\hbar} e^{-ip_0(t-t')/\hbar} \frac{\hbar}{p_0 - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + i\epsilon}$$

$p'_0 = p_0 - \mathbf{p}^2/2m$ と置き換えて、 p'_0 での積分部分だけを取り出して計算すると

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp'_0}{2\pi} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}i(p'_0 + \frac{\mathbf{p}^2}{2m})(t-t')\right] \frac{\hbar}{p'_0 + i\epsilon} \\ &= \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\frac{\mathbf{p}^2}{2m}(t-t')\right] \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp'_0}{2\pi\hbar} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}p'_0(t'-t)\right] \frac{\hbar}{p'_0 + i\epsilon} \end{aligned}$$

ϵ を0に取ることから、階段関数の積分形(下の補足)を使えば

$$\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp'_0}{2\pi\hbar} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}p'_0(t'-t)\right] \frac{1}{p'_0 + i\epsilon} = \hbar \frac{-i}{\hbar} \Theta\left(\frac{t'-t}{\hbar}\right) = -i\Theta(t'-t)$$

階段関数の変数の定数倍は意味がないです。遅延グリーン関数での時間順序 $t-t'$ が出てきています。 p の積分部分とあわせれば

$$\begin{aligned} G_0^+(x; x') &= -i \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\right] \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\frac{\mathbf{p}^2}{2m}(t-t')\right] \Theta(t-t') \\ &= -i \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}') - \frac{\mathbf{p}^2}{2m}(t-t'))\right] \Theta(t-t') \end{aligned}$$

このように、遅延グリーン関数を表わす $t' > t$ の情報を $+i\epsilon$ によって加えられるので、境界条件は $+i\epsilon$ と同じです。

先進、遅延グリーン関数の話は終わりにします。ここから、時間依存するポテンシャルを含むシュレーディンガー方程式の波動関数が、ポテンシャルのない遅延グリーン関数によって与えられることを見ていきます。

ポテンシャル $V(\mathbf{x}, t)$ を含むシュレーディンガー方程式は

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_0)\psi(\mathbf{x}, t) = V(\mathbf{x}, t)\psi(\mathbf{x}, t)$$

ハミルトニアン \hat{H} は $\hat{H} = \hat{H}_0 + V(\mathbf{x}, t)$ としています。 \hat{H}_0 は自由粒子でのハミルトニアンです。自由粒子でのシュレーディンガー方程式の波動関数を $\phi(\mathbf{x}, t)$ 、グリーン関数を G_0 として

$$\begin{aligned} (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_0)\phi(\mathbf{x}, t) &= 0 \\ (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_0)G_0(x; x') &= \hbar\delta(t-t')\delta^3(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \end{aligned}$$

と与えます。

ポテンシャルを設定します。ポテンシャルに自由粒子が入射していき、ポテンシャル $V(x_1, t_1)$ は時間 t_1 において短い時間間隔 Δt_1 だけ作用するとし、 t_1 より前の時間にはポテンシャルは作用しないと設定します。 t_1 でポテンシャルの影響を受けるので、そのシュレーディンガー方程式を

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - \hat{H}_0)\psi(x_1, t_1) = V(x_1, t_1)\psi(x_1, t_1) \quad (7)$$

ポテンシャルが寄与している時間と位置の意味で t_1, x_1 としています。 V が作用していない時間では、右辺は 0 になります。

ポテンシャルは微小時間しか作用しないので、その瞬間の影響は小さいと考えます。そうすると、ポテンシャルの影響を受けた波動関数 $\psi(x, t)$ は入射波としての波動関数 $\phi(x, t)$ から急激に変化しないとし、その寄与を $\Delta\psi(x_1, t_1)$ として

$$\psi(x_1, t_1) = \phi(x_1, t_1) + \Delta\psi(x_1, t_1) \quad (8)$$

と書けるとします。 $\Delta\psi(x_1, t_1)$ は十分小さく、 Δt_1 の間にポテンシャルは寄与するので t_1 の瞬間では $\Delta\psi(x_1, t_1) = 0$ とします。(8) を (7) に入れれば

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - \hat{H}_0)(\phi(x_1, t_1) + \Delta\psi(x_1, t_1)) = V(x_1, t_1)(\phi(x_1, t_1) + \Delta\psi(x_1, t_1))$$

$\phi(x_1, t_1)$ は自由粒子でのシュレーディンガー方程式を満たすので、左辺第 1 項は消えて

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - \hat{H}_0)\Delta\psi(x_1, t_1) = V(x_1, t_1)(\phi(x_1, t_1) + \Delta\psi(x_1, t_1))$$

$V\phi$ に比べて $V\Delta\psi$ は小さいので無視して

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - \hat{H}_0)\Delta\psi(x_1, t_1) = V(x_1, t_1)\phi(x_1, t_1)$$

これを時間積分します。

ポテンシャルが $t_1 \sim t_1 + \Delta t_1$ の間に作用するので、積分範囲をこれに取り

$$i\hbar\Delta\psi(x_1, t_1 + \Delta t_1) - i\hbar\Delta\psi(x_1, t_1) = \int_{t_1}^{t_1 + \Delta t_1} dt' (\hat{H}_0\Delta\psi(x_1, t') + V(x_1, t')\phi(x_1, t'))$$

$\Delta\psi(x_1, t_1) = 0$ とするので、左辺の第 2 項は消します。右辺の積分を実行した後を $F(t)$ と書くことにすれば

$$F(t_1 + \Delta t_1) - F(t_1) = F(t_1) + \frac{dF(t_1)}{dt_1}\Delta t_1 + \dots - F(t_1)$$

となっているので、 Δt_1 の 1 次までで

$$\int_{t_1}^{t_1+\Delta t_1} dt' (\hat{H}_0 \Delta\psi(\mathbf{x}_1, t') + V(\mathbf{x}_1, t') \phi(\mathbf{x}_1, t')) \simeq (\hat{H}_0 \Delta\psi(\mathbf{x}_1, t_1) + V(\mathbf{x}_1, t_1) \phi(\mathbf{x}_1, t_1)) \Delta t_1$$

$\Delta\psi(\mathbf{x}_1, t') \Delta t_1$ は微小量の 2 乗なので無視して

$$i\hbar \Delta\psi(\mathbf{x}_1, t_1 + \Delta t_1) \simeq V(\mathbf{x}_1, t_1) \phi(\mathbf{x}_1, t_1) \Delta t_1 \quad (9)$$

ポテンシャルの影響を自由粒子の波動関数 ϕ で与えられています。

$t_1 + \Delta t_1$ 以降の時間ではポテンシャルは効いてこないで、自由粒子のシュレーディンガー方程式に従うようになります。 $t' > t_1 + \Delta t_1$ として、 $\psi(\mathbf{x}', t') + \Delta\psi(\mathbf{x}', t')$ が自由粒子でのシュレーディンガー方程式に従うので、方程式の線形性から $\Delta\psi(\mathbf{x}', t')$ 自身が自由粒子でのシュレーディンガー方程式に従います。なので、遅延グリーン関数 G_0^+ を使って散乱後の $\Delta\psi(\mathbf{x}', t')$ は $\Delta\psi(\mathbf{x}_1, t_1 + \Delta t_1)$ からの時間発展として

$$\Delta\psi(\mathbf{x}', t') = i \int d^3x_1 G_0^+(\mathbf{x}', t'; \mathbf{x}_1, t_1 + \Delta t_1) \Delta\psi(\mathbf{x}_1, t_1 + \Delta t_1)$$

と与えられます。係数に i をつけているのは、こうすると便利というだけです (G_0^+ の定義に i を加えるか加えないかの違い)。(9) を入れて

$$\begin{aligned} \Delta\psi(\mathbf{x}', t') &= i \int d^3x_1 G_0^+(\mathbf{x}', t'; \mathbf{x}_1, t_1) \frac{-i}{\hbar} V(\mathbf{x}_1, t_1) \phi(\mathbf{x}_1, t_1) \Delta t_1 \\ &= \frac{1}{\hbar} \int d^3x_1 G_0^+(\mathbf{x}', t'; \mathbf{x}_1, t_1) V(\mathbf{x}_1, t_1) \phi(\mathbf{x}_1, t_1) \Delta t_1 \end{aligned} \quad (10)$$

これによって自由粒子の波動関数と遅延グリーン関数から、ポテンシャルによって散乱された後の寄与が求められます。

散乱後の寄与が求められたので、散乱後の波動関数も求まります。 $\phi(\mathbf{x}', t')$ と $\Delta\psi(\mathbf{x}', t')$ を足したものが散乱後の $\psi(\mathbf{x}', t')$ になるので

$$\psi(\mathbf{x}', t') = \phi(\mathbf{x}', t') + \Delta\psi(\mathbf{x}', t')$$

$\phi(\mathbf{x}', t')$ は (10) と同様に $G_0^+(\mathbf{x}', t'; \mathbf{x}, t)$ によって

$$\phi(\mathbf{x}', t') = i \int d^3x G_0^+(\mathbf{x}', t'; \mathbf{x}, t) \phi(\mathbf{x}, t) \quad (11)$$

これと (10) を使うことで

$$\begin{aligned}
\psi(\mathbf{x}', t') &= \phi(\mathbf{x}', t') + \Delta\psi(\mathbf{x}', t') \\
&= \phi(\mathbf{x}', t') + \frac{1}{\hbar} \int d^3x_1 G_0^+(\mathbf{x}', t'; \mathbf{x}_1, t_1) V(\mathbf{x}_1, t_1) \phi(\mathbf{x}_1, t_1) \Delta t_1 \\
&= i \int d^3x G_0^+(\mathbf{x}', t'; \mathbf{x}, t) \phi(\mathbf{x}, t) \\
&\quad + \frac{i}{\hbar} \int d^3x_1 \Delta t_1 G_0^+(\mathbf{x}', t'; \mathbf{x}_1, t_1) V(\mathbf{x}_1, t_1) \int d^3x G_0^+(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}, t) \phi(\mathbf{x}, t) \\
&= i \int d^3x (G_0^+(\mathbf{x}', t'; \mathbf{x}, t) \\
&\quad + \frac{1}{\hbar} \int d^3x_1 \Delta t_1 G_0^+(\mathbf{x}', t'; \mathbf{x}_1, t_1) V(\mathbf{x}_1, t_1) G_0^+(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}, t)) \phi(\mathbf{x}, t) \tag{12}
\end{aligned}$$

として、散乱後の波動関数を自由粒子の波動関数と遅延グリーン関数によって書けます。

次に、 (\mathbf{x}_1, t_1) の後にさらに (\mathbf{x}_2, t_2) ($t_2 > t_1$) でも同様にポテンシャルの影響を受けるとします。やることは同じで、 $V(\mathbf{x}_2, t_2)$ でも散乱を受けた後の波動関数は

$$\psi(\mathbf{x}', t') = \psi_1(\mathbf{x}', t') + \Delta\psi_2(\mathbf{x}', t') = \phi(\mathbf{x}', t') + \Delta\psi_1(\mathbf{x}', t') + \Delta\psi_2(\mathbf{x}', t') \tag{13}$$

$V(\mathbf{x}_1, t_1)$ での影響を $\Delta\psi_1$ 、それによる波動関数を ψ_1 とし、 $V(\mathbf{x}_2, t_2)$ での影響を $\Delta\psi_2$ としています。これから分かるように、(10) の右辺の波動関数を $\psi_1(\mathbf{x}_2, t_2)$ と思えばいいだけです。つまり、ポテンシャル $V(\mathbf{x}_2, t_2)$ の影響を受ける前の波動関数を $V(\mathbf{x}_1, t_1)$ で散乱を受けた後の波動関数にするだけです。

$V(\mathbf{x}_2, t_2)$ での散乱による $\Delta\psi_2$ を求めるために、(10) を置き換えれば ($t' > t_2 + \Delta t_2$)

$$\Delta\psi_2(\mathbf{x}', t') = \frac{1}{\hbar} \int d^3x_2 G_0^+(\mathbf{x}', t'; \mathbf{x}_2, t_2) V(\mathbf{x}_2, t_2) \psi(\mathbf{x}_2, t_2) \Delta t_2$$

そうすると、(12) を使うことで

$$\begin{aligned}
\Delta\psi_2(\mathbf{x}', t') &= \frac{1}{\hbar} \int d^3x_2 G_0^+(\mathbf{x}', t'; \mathbf{x}_2, t_2) V(\mathbf{x}_2, t_2) \Delta t_2 \\
&\quad \times i \int d^3x (G_0^+(\mathbf{x}_2, t_2; \mathbf{x}, t) + \frac{1}{\hbar} \int d^3x_1 \Delta t_1 G_0^+(\mathbf{x}_2, t_2; \mathbf{x}_1, t_1) V(\mathbf{x}_1, t_1) G_0^+(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}, t)) \phi(\mathbf{x}, t) \\
&= \frac{1}{\hbar} \int d^3x_2 G_0^+(\mathbf{x}', t'; \mathbf{x}_2, t_2) V(\mathbf{x}_2, t_2) \Delta t_2 \\
&\quad \times (\phi(\mathbf{x}_2, t_2) + \frac{1}{\hbar} \int d^3x_1 \Delta t_1 G_0^+(\mathbf{x}_2, t_2; \mathbf{x}_1, t_1) V(\mathbf{x}_1, t_1) \phi(\mathbf{x}_1, t_1)) \\
&= \frac{1}{\hbar} \int d^3x_2 \Delta t_2 G_0^+(\mathbf{x}', t'; \mathbf{x}_2, t_2) V(\mathbf{x}_2, t_2) \phi(\mathbf{x}_2, t_2) \\
&\quad + \frac{1}{\hbar^2} \int d^3x_1 d^3x_2 \Delta t_1 \Delta t_2 G_0^+(\mathbf{x}', t'; \mathbf{x}_2, t_2) V(\mathbf{x}_2, t_2) G_0^+(\mathbf{x}_2, t_2; \mathbf{x}_1, t_1) V(\mathbf{x}_1, t_1) \phi(\mathbf{x}_1, t_1) \tag{14}
\end{aligned}$$

最後に (11) を使っています。後は同じように計算すればいいです。

(13) と (14) から $((x, t)$ を (x) と書くことにします)

$$\begin{aligned}\psi(x') &= \phi(x') + \frac{1}{\hbar} \int d^3x_1 \Delta t_1 G_0^+(x'; x_1) V(x_1) \phi(x_1) \\ &\quad + \frac{1}{\hbar} \int d^3x_2 \Delta t_2 G_0^+(x'; x_2) V(x_2) \phi(x_2) \\ &\quad + \frac{1}{\hbar^2} \int d^3x_1 \Delta t_1 d^3x_2 \Delta t_2 G_0^+(x'; x_2) V(x_2) G_0^+(x_2; x_1) V(x_1) \phi(x_1)\end{aligned}$$

となり、2回ポテンシャルの影響があった場合も自由粒子の波動関数とグリーン関数で書けます。最後の式の1行目は1回目の場合で、2行目以降が2回目の影響部分になっています。

この結果から、法則性があることが予想でき、これは

$$\begin{aligned}\psi(x') &= \phi(x') + \frac{1}{\hbar} \sum_i \int d^3x_i \Delta t_i G_0^+(x'; x_i) V(x_i) \phi(x_i) \\ &\quad + \frac{1}{\hbar^2} \sum_{i,j:t_i > t_j} \int d^3x_i \Delta t_i d^3x_j \Delta t_j G_0^+(x'; x_i) V(x_i) G_0^+(x_i; x_j) V(x_j) \phi(x_j) \\ &\quad + \frac{1}{\hbar^3} \sum_{i,j,k:t_i > t_j > t_k} \int d^3x_i \Delta t_i d^3x_j \Delta t_j d^3x_k \Delta t_k G_0^+(x'; x_i) V(x_i) G_0^+(x_i; x_j) V(x_j) G_0^+(x_j; x_k) V(x_k) \phi(x_k) \\ &\quad + \dots\end{aligned}\tag{15}$$

今は遅延グリーン関数を使っているので、和は i, j, k, \dots での時間が $t_i > t_j > t_k > \dots$ となるように取っていくという意味です。遅延グリーン関数の性質からそうならないときは0になるので、今は関係ないです。さらに

$$\phi(x_i) = i \int d^3x G_0^+(x_i; x) \phi(x)$$

を使えば

$$\begin{aligned}\psi(x') &= i \int d^3x (G_0^+(x'; x_i) + \frac{1}{\hbar} \sum_i \int d^3x_i \Delta t_i G_0^+(x'; x_i) V(x_i) G_0(x_i; x) \\ &\quad + \frac{1}{\hbar^2} \sum_{i,j:t_i > t_j} \int d^3x_i \Delta t_i d^3x_j \Delta t_j G_0^+(x'; x_i) V(x_i) G_0^+(x_i; x_j) V(x_j) G_0^+(x_j; x) \\ &\quad + \frac{1}{\hbar^3} \sum_{i,j,k:t_i > t_j > t_k} \int d^3x_i \Delta t_i d^3x_j \Delta t_j d^3x_k \Delta t_k G_0^+(x'; x_i) V(x_i) G_0^+(x_i; x_j) V(x_j) G_0^+(x_j; x_k) V(x_k) G_0^+(x_k; x) \\ &\quad + \dots) \phi(x)\end{aligned}$$

括弧で囲まれている部分を G^+ とすれば

$$\psi(x') = i \int d^3x G^+(x'; x) \phi(x)$$

と書けます。この $G(x'; x)$ が、 x から x' に行くまでのポテンシャルの影響を含みます。

有限の間隔 Δt を使ってきましたが、 $\Delta t \rightarrow 0$ として時間を連続にします。これによって、離散的に寄与していたポテンシャルが連続的に寄与するので、(15) の和は積分になります。

和は時間に対してなので、3次元積分は4次元積分 d^4x となり、 $G(x'; x)$ は $(x' > x_1 > x_2 > x)$

$$\begin{aligned}
G^+(x'; x) &= G_0^+(x'; x) + \frac{1}{\hbar} \int d^4x_1 G_0^+(x'; x_1) V(x_1) G_0^+(x_1; x) \\
&\quad + \frac{1}{\hbar^2} \int d^4x_1 d^4x_2 G_0^+(x'; x_1) V(x_1) G_0^+(x_1; x_2) V(x_2) G_0^+(x_2; x) \\
&\quad + \dots \\
&= G_0^+(x'; x) + \frac{1}{\hbar} \int d^4x_1 G_0^+(x'; x_1) V(x_1) \\
&\quad \times (G_0^+(x_1; x) + \frac{1}{\hbar} \int d^4x_2 G_0^+(x_1; x_2) V(x_2) G_0^+(x_2; x) + \dots)
\end{aligned} \tag{16}$$

$G^+(x_1; x)$ は

$$\begin{aligned}
G^+(x_1; x) &= G_0^+(x_1; x) + \frac{1}{\hbar} \int d^4x_2 G_0^+(x_1; x_2) V(x_2) G_0^+(x_2; x) \\
&\quad + \frac{1}{\hbar^2} \int d^4x_2 d^4x_3 G_0^+(x_1; x_2) V(x_2) G_0^+(x_2; x_3) V(x_3) G_0^+(x_3; x) \\
&\quad + \dots
\end{aligned}$$

なので、(16) は入れ子構造になっており

$$G^+(x'; x) = G_0^+(x'; x) + \frac{1}{\hbar} \int d^4x_1 G_0^+(x'; x_1) V(x_1) G^+(x_1; x) \tag{17}$$

これによって、入射波の波動関数 $\phi(x)$ から散乱後の波動関数 $\psi(x')$ は

$$\begin{aligned}
\psi(x') &= i \int d^3x G^+(x'; x) \phi(x) \\
&= i \int d^3x (G_0^+(x'; x) + \frac{1}{\hbar} \int d^4x_1 G_0^+(x'; x_1) V(x_1) G^+(x_1; x)) \phi(x) \\
&= \phi(x') + \frac{1}{\hbar} \int d^4x_1 G_0^+(x'; x_1) V(x_1) \psi(x_1)
\end{aligned} \tag{18}$$

第1項がポテンシャルの寄与を受けずに抜けてきた入射波、第2項が $V(x_1)$ で生じる散乱波となります。(17),(18) をリップマン・シュウィンガー (Lippmann-Schwinger) 方程式と呼びます。これが解になっていることは

$$\begin{aligned}
(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_0)\psi(x) &= (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_0)\phi(x) + \frac{1}{\hbar}(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_0) \int d^4x_1 G_0^+(x; x_1) V(x_1)\psi(x_1) \\
&= \int d^4x_1 \delta(t - t_1) \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1) V(x_1)\psi(x_1) \\
&= V(x)\psi(x)
\end{aligned}$$

となることから確かめられます。

・補足

階段関数の微分を求めます。階段関数の積分形は

$$\Theta(\tau) = -\frac{1}{2i\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dw \frac{e^{-iw\tau}}{w + i\epsilon}$$

これを τ で微分すると

$$\frac{d\Theta(\tau)}{d\tau} = -\frac{1}{2i\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dw \frac{d}{d\tau} \frac{e^{-iw\tau}}{w + i\epsilon} = -\frac{1}{2i\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dw \frac{-iwe^{-iw\tau}}{w + i\epsilon}$$

分子に w が出てきたために $\epsilon = 0$ で極 (分母が 0 になる場所) がないので、 $\epsilon = 0$ とし、デルタ関数の性質

$$\delta(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} dwe^{-iw\tau}$$

から、階段関数の微分は

$$\frac{d\Theta(\tau)}{d\tau} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dwe^{-iw\tau} = \frac{1}{2\pi} 2\pi\delta(\tau) = \delta(\tau)$$

と求まります。