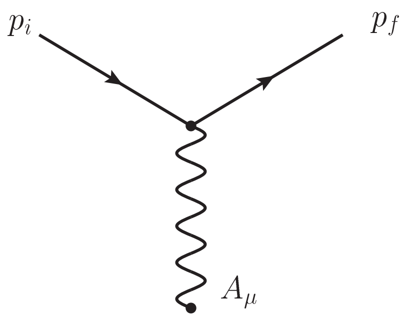
ラザフォード散乱

ラザフォード散乱を見ていきます。これは、電荷を持った重い原子核が固定されていて、そのクーロンポテンシャルに電子が突っ込んだ時の散乱です。
ここでは摂動展開の最低次の計算を行います。

散乱の様子を図にすれば



このように散乱の過程を書いた図をファインマン図 (Feynman diagram) と呼びます。ここではファインマン図を利用せずに求めていくので、ファインマン図の説明は「ファインマン図」を見てください。
ファインマン図のことは忘れて、S 行列を直接扱います。電子が電磁場によって散乱されるときの S 行列は

$$S = \delta_{fi} - i\frac{q}{\kappa_b}\int d^4x\overline{\phi}_f(x)\gamma^\mu A_\mu(x)\psi_i(x) \tag{1}$$

ψ_i は散乱の寄与を受けた波動関数です。q は電荷です。ここでは摂動展開の最低次からの寄与を見ることにして、$\psi_i(x)$ を自由粒子とします。自由粒子の波動関数を体積 V で規格化して

$$\phi_i(x) = \sqrt{\frac{m}{E_iV}}u(p_i, s_i)e^{-ip_ix} \quad\quad (E_i = \sqrt{\boldsymbol{p}_i^2 + m^2}) \tag{2}$$

s_i はスピンを表します。u は平面波での正エネルギーのスピノール部分で、スピン s によって 2 つに区別します (相対論的量子力学の「射影演算子」参照)。紛らわしいですが、p_i^μ の i は始状態のことで 3 次元成分のことではないです。終状態も始状態と同じように

$$\overline{\phi}_f(x) = \sqrt{\frac{m}{E_fV}}\overline{u}(p_f, s_f)e^{ip_fx} \tag{3}$$

とします ($\overline{\psi} = \psi^\dagger\gamma_0$)。
ラザフォード散乱では固定された電荷による静電場 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x})$ のみを考えるので、ベクトルポテンシャル $\boldsymbol{A}$ は 0 です。静電場でのクーロンポテンシャル A_0 は

$$A_0(\boldsymbol{x}) = \kappa_b \Phi(\boldsymbol{x}) = \kappa_e \kappa_b \frac{q}{|\boldsymbol{x}|}$$

$$\nabla \Phi(\boldsymbol{x}) = -\boldsymbol{E} = -\kappa_e \frac{q}{|\boldsymbol{x}|^2} \frac{\boldsymbol{x}}{|\boldsymbol{x}|} \;\Rightarrow\; \Phi(\boldsymbol{x}) = \kappa_e \frac{q}{|\boldsymbol{x}|}$$

なので、原子番号 Z の原子核として

$$A_0(x) = \kappa_e \kappa_b \frac{Q}{|\boldsymbol{x}|}\ ,\ \boldsymbol{A}(x) = 0 \quad (Q = Ze) \tag{4}$$

e は素電荷、κ_e は CGS ガウスなら 1，ヘヴィサイド・ローレンツなら $1/4\pi$、κ_b は自然単位系ではどちらでも 1 です。

電子が原子核から反発されるとして $q = -e$ とすれば、(2) から (4) を (1) に入れて

$$S = i\frac{Z\alpha}{V}\sqrt{\frac{m^2}{E_i E_f}}\overline{u}(p_f, s_f)\gamma_0 u(p_i, s_i)\int d^4x \frac{1}{|\boldsymbol{x}|}\exp[i(p_f - p_i)\cdot x] \quad (\alpha = \kappa_e e^2)$$

散乱した場合が知りたいので、散乱しないときの δ_{fi} は省いています。$\overline{u}\gamma_0 u$ はディラック方程式のカレント $e\overline{u}\gamma_\mu u$ の 0 成分です。このことから、始状態から終状態へと偏移するカレントとして $e\overline{u}(p_f, s_f)\gamma_0 u(p_i, s_i)$ を含んでいると言えます ($\boldsymbol{A} \neq 0$ なら γ_μ になる)。これは粒子の散乱は始状態から終状態への確率の流れに対応することからすれば、予想通りの構造です。

S 行列を作れたので、後は積分を実行すればいいです。まず、exp 内をエネルギーと運動量にわけて

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \exp[i(E_f - E_i)x_0]\int d^3x \exp[-i(\boldsymbol{p}_f - \boldsymbol{p}_i)\cdot \boldsymbol{x}]\frac{1}{|\boldsymbol{x}|}$$

エネルギー部分の積分はデルタ関数になるだけです。残りの積分には問題があり、$|\boldsymbol{x}| = 0$ で発散していますなので、電磁気なんかで出てくるように

$$\nabla^2 \frac{1}{|\boldsymbol{x}|} = -4\pi\delta^3(\boldsymbol{x}) \tag{5}$$

を使います (電磁気の「静電場」参照)。積分を変形していき、これを使えば

$$
\begin{aligned}
\int d^3x \exp[-i(\boldsymbol{p}_f - \boldsymbol{p}_i)\cdot\boldsymbol{x}]\frac{1}{|\boldsymbol{x}|} &= -\int d^3x \frac{1}{|\boldsymbol{x}|}\frac{1}{\boldsymbol{q}^2}\nabla^2 \exp[-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}] \quad (\boldsymbol{q} = \boldsymbol{p}_f - \boldsymbol{p}_i) \\
&= -\frac{1}{\boldsymbol{q}^2}\Big(\big[\frac{1}{|\boldsymbol{x}|}\nabla \exp[-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}]\big]_{-\infty}^{\infty} - \int d^3x (\nabla\frac{1}{|\boldsymbol{x}|})\cdot\nabla\exp[-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}]\Big) \\
&= -\frac{1}{\boldsymbol{q}^2}\Big(\big[\frac{1}{|\boldsymbol{x}|}\nabla \exp[-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}]\big]_{-\infty}^{\infty} - \big[(\nabla\frac{1}{|\boldsymbol{x}|})\exp[-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}]\big]_{-\infty}^{\infty} \\
&\qquad + \int d^3x (\nabla^2\frac{1}{|\boldsymbol{x}|})\exp[-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}]\Big) \\
&= -\frac{1}{\boldsymbol{q}^2}\int d^3x (\nabla^2\frac{1}{|\boldsymbol{x}|})\exp[-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}] \\
&= \frac{4\pi}{\boldsymbol{q}^2}
\end{aligned}
$$

部分積分で出てくる $\big[\ \big]_{-\infty}^{\infty}$ は、形式的に 3 次元全空間の範囲を書いています。もっと正確に行うなら、ガウスの定理から面積分にして無限遠の面では 0 になることを見ればいいです。というわけで

$$
S = i\frac{Z\alpha}{V}\sqrt{\frac{m^2}{E_iE_f}}\overline{u}(p_f, s_f)\gamma_0 u(p_i, s_i)\frac{4\pi}{\boldsymbol{q}^2}\delta(E_f - E_i)
$$

後は断面積が分かればいいです。

断面積 $d\sigma$ は T を時間、J_{in} を入射粒子のフラックスとして

$$
d\sigma = \frac{1}{J_{in}T}S^2 N_f \quad (N_f = \frac{V}{(2\pi)^3}d^3p)
$$

体積 V で規格化しているので、周期的境界条件における運動量での状態数 N_f を使っています。$W = S^2N_f$ は

$$
\begin{aligned}
W &= \frac{Vd^3p}{(2\pi)^3}(i\frac{Z\alpha}{V}\sqrt{\frac{m^2}{E_iE_f}}x\overline{u}(p_f, s_f)\gamma_0 u(p_i, s_i)\frac{4\pi}{\boldsymbol{q}^2}\delta(E_f - E_i))^2 \\
&= \frac{Z^2\alpha^2(4\pi)^2m^2}{E_iV}\frac{|\overline{u}(p_f, s_f)\gamma_0 u(p_i, s_i)|^2}{|\boldsymbol{q}|^4}\frac{d^3p_f}{(2\pi)^3E_f}(2\pi\delta(E_f - E_i))^2
\end{aligned}
$$

ここでデルタ関数の 2 乗というわけのわからないものが出てきます。そのために、かなりひねったことをします。

まず、デルタ関数の積分形は積分範囲を無限大にしますが、時間 T による有限の範囲とします。デルタ関数を有限範囲の exp の積分形にして、積分を実行すると

$$
\begin{aligned}
2\pi\delta(E_f - E_i) \ \Rightarrow\ & \int_{-T/2}^{T/2} dt \exp[i(E_f - E_i)t] \\
&= \big[\frac{\exp[i(E_f - E_i)t]}{i(E_f - E_i)}\big]_{-T/2}^{T/2} \\
&= \frac{\cos((E_f - E_i)\frac{T}{2}) + i\sin((E_f - E_i)\frac{T}{2}) - \cos(-(E_f - E_i)\frac{T}{2}) - i\sin(-(E_f - E_i)\frac{T}{2})}{i(E_f - E_i)} \\
&= \frac{2\sin((E_f - E_i)\frac{T}{2})}{E_f - E_i}
\end{aligned}
$$

これなら 2 乗を取れるので

$$(2\pi\delta(E_f - E_i))^2 \ \Rightarrow\ \frac{4\sin^2\left((E_f - E_i)\frac{T}{2}\right)}{(E_f - E_i)^2}$$

となりますが、これをさらに E_f で積分すると、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE_f (2\pi\delta(E_f - E_i))^2 \ \Rightarrow\ \int_{-\infty}^{\infty} dE_f \frac{4\sin^2((E_f - E_i)\frac{T}{2})}{(E_f - E_i)^2} = 4\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\sin^2(\frac{T}{2}x)}{x^2} = 2\pi T \qquad (6)$$

積分の簡易的な導出は下の補足 1 で示しています。

これとは別に、$(2\pi\delta(E_f - E_i))^2$ は

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE_f \ (2\pi\delta(E_f - E_i))^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dE_f \ 2\pi\delta(0)2\pi\delta(E_f - E_i)$$

と書き換えられるとします。そして、$2\pi\delta(0)$ は今見たのと同じように有限の範囲で表してやれば

$$2\pi\delta(0) \ \Rightarrow\ \int_{-T/2}^{T/2} dt = T$$

なので

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE_f (2\pi\delta(E_f - E_i))^2 = 2\pi T \int_{-\infty}^{\infty} dE_f \delta(E_f - E_i)$$

そして、左辺は (6) から $2\pi T$ になるので、これは成立しています。よって、この式から積分を外せばデルタ関数の 2 乗は

$$(2\pi\delta(E_f - E_i))^2 = 2\pi T\delta(E_f - E_i)$$

となることがわかり、これによって W は

$$W = \frac{Z^2\alpha^2(4\pi)^2m^2}{E_iV}\frac{|\overline{u}(p_f,s_f)\gamma_0 u(p_i,s_i)|^2}{|\boldsymbol{q}|^4}\frac{d^3p_f}{(2\pi)^3E_f}2\pi T\delta(E_f-E_i)$$

となります。

残っている入射フラックス J_{in} は「S 行列」での話から、入射粒子の標的に対する入射粒子の相対速度を $|\boldsymbol{v}|$、密度を ρ とすれば $J_{iu}=\rho|\boldsymbol{v}|$ です。今は体積 V に 1 つの入射粒子として規格化しているので、$J_{iu}=|\boldsymbol{v}|/V$ です。これは確率のカレントとフラックスが対応することからも出てきます (補足 2 で求めています)。

これで断面積を求めるのに必要なものはそろったので、まとめると

$$\begin{aligned}
d\sigma &= \frac{W}{TJ_{in}}\\
&= \frac{Z^2\alpha^2(4\pi)^2m^2}{TVE_i}\frac{|\overline{u}(p_f,s_f)\gamma_0 u(p_i,s_i)|^2}{|\boldsymbol{q}|^4}\frac{d^3p_f}{(2\pi)^3E_f}2\pi T\delta(E_f-E_i)\frac{V}{|\boldsymbol{v}|}\\
&= \frac{4Z^2\alpha^2m^2}{|\boldsymbol{v}|E_i}\frac{d^3p_f}{E_f}\frac{1}{|\boldsymbol{q}|^4}|\overline{u}(p_f,s_f)\gamma_0 u(p_i,s_i)|^2\delta(E_f-E_i)
\end{aligned}$$

これには、エネルギー保存を表す E_i,E_f によるデルタ関数しか出てきていなく、運動量保存がいません。運動量が保存されていない理由は単純で、入射してきた電子は標的の電荷によって反跳するのに対して、標的にされた電荷を固定して反跳させていないからです。

微分断面積を、ある微小領域に粒子が散乱して来る数として定義します。微小領域を立体角 Ω として微分断面積を $d\sigma/d\Omega$ とします。極座標として立体角を使い

$$d^3p_f = \boldsymbol{p}_f^2 d|\boldsymbol{p}_f|d\Omega_f \tag{7}$$

このように置き換えてやります (3 次元積分を動径方向と角度部分に分離しただけ)。これは簡単に言えば、$d|\boldsymbol{p}_f|$ を高さと思い、立体角は dA を面積として

$$d\Omega_f = \frac{dA}{\boldsymbol{p}_f^2}$$

としたもので、(7) に入れれば体積 d^3p_f になります。

d^3p_f を立体角に置き換えれば

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_f} = \frac{4Z^2\alpha^2m^2}{|\boldsymbol{v_i}|E_i}\frac{\boldsymbol{p}_f^2d|\boldsymbol{p}_f|}{E_f}\frac{1}{|\boldsymbol{q}|^4}|\overline{u}(p_f,s_f)\gamma_0 u(p_i,s_i)|^2\delta(E_f-E_i)$$

ただし、実験はある運動量領域の範囲で行われるので、これを適当な範囲で積分し

$$
\begin{aligned}
\frac{d\sigma}{d\Omega_f} &= \int d|\boldsymbol{p}_f|\frac{\boldsymbol{p}_f^2}{E_iE_f}\frac{4Z^2\alpha^2m^2}{|\boldsymbol{v_i}|}\frac{1}{|\boldsymbol{q}|^4}|\overline{u}(p_f,s_f)\gamma_0u(p_i,s_i)|^2\delta(E_f-E_i) \\
&= \frac{4Z^2\alpha^2m^2|\overline{u}(p_f,s_f)\gamma_0u(p_i,s_i)|^2}{|\boldsymbol{q}|^4}\frac{|\boldsymbol{p}_f|}{|\boldsymbol{p}_i|}\int dE_f\delta(E_f-E_i) \\
&= \frac{4Z^2\alpha^2m^2|\overline{u}(p_f,s_f)\gamma_0u(p_i,s_i)|^2}{|\boldsymbol{q}|^4}\int dE_f\delta(E_f-E_i) \\
&= \frac{4Z^2\alpha^2m^2}{|\boldsymbol{q}|^4}|\overline{u}(p_f,s_f)\gamma_0u(p_i,s_i)|^2
\end{aligned}
$$

というものが使われます。途中で、$E_f^2=\boldsymbol{p}_f^2+m^2$ から

$$
2E_f=\frac{d\boldsymbol{p}_f^2}{dE_f}=\frac{d\boldsymbol{p}_f^2}{d|\boldsymbol{p}_f|}\frac{d|\boldsymbol{p}_f|}{dE_f}=2|\boldsymbol{p}_f|\frac{d|\boldsymbol{p}_f|}{dE_f}\ \Rightarrow\ E_fdE_f=|\boldsymbol{p}_f|d|\boldsymbol{p}_f|
$$

となることと、エネルギー保存 $E_i=E_f$ が満たされているので $|\boldsymbol{p}_f|=|\boldsymbol{p}_i|$ として

$$
\frac{|\boldsymbol{p}_f|}{E_i|\boldsymbol{v}_i|}=\frac{|\boldsymbol{p}_f|}{|\boldsymbol{p}_i|}=1
$$

となることを使っています。というわけで、電子がクーロンポテンシャルによって散乱する場合での微分断面積は

$$
\frac{d\sigma}{d\Omega_f}=\frac{4Z^2\alpha^2m^2|\overline{u}(p_f,s_f)\gamma_0u(p_i,s_i)|^2}{|\boldsymbol{q}|^4}
$$

これではまだ不完全で、スピンの和をとる必要があります。これは「ラザフォード散乱～スピン偏極～」で行います。

　スピンが無関係となる非相対論的な極限にしてみます。非相対論的極限では、ディラック・パウル表現ではスピノールの 4 成分のうち上の 2 成分のみが生き残るので γ_0 は 2×2 成分だけ取り出して

$$
\gamma_0=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}
$$

そして、2 成分にした u はスピン上向きの状態として

$$
u=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}
$$

と選びます。そうすれば

$$
(1\ 0)\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=1
$$

となるので

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_f} = \frac{4Z^2\alpha^2 m^2}{|\boldsymbol{q}|^4}$$

これはラザフォードの散乱公式です (大まかには言えば $e^4/|\boldsymbol{q}|^4$ に比例する)。

・補足 1

(6) の積分

$$4\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\sin^2(\frac{T}{2}x)}{x^2} = 2\pi T$$

を求めます。複素積分から求められますが、ここでは簡易的な方法を使います。

デルタ関数は 0 で値を持ちますが、今は有限の範囲にしているために、$x=0$ で鋭いピークを持つガウス分布のような形になっています。言い換えれば、$x=0$ で頂点を持つ三角形が $x=0$ 付近にあり、そこ以外は 0 と見なせます。このことから、この三角形の面積が積分結果になると考えます。

sin を展開すれば

$$\begin{aligned}\frac{4\sin^2(\frac{T}{2}x)}{x^2} &= \frac{4}{x^2}\frac{T^2}{4}(x - \frac{1}{6}x^3 + \cdots)^2 = \frac{T^2}{x^2}(x^2 - \frac{1}{6}x^4 + \cdots) \quad (\sin(x) = x - \frac{1}{6}x^3 + \cdots)\\ &= T^2(1 - \frac{1}{6}x^2 + \cdots)\end{aligned}$$

これは $x=0$ で

$$\lim_{x\to 0}\frac{4\sin^2(\frac{T}{2}x)}{x^2} = T^2$$

なので、T^2 が三角形の高さです。底辺は、$x=0$ に一番近い sin 部分が 0 になる地点間の差なので

$$x = \pm\frac{2\pi}{T}$$

から、$4\pi/T$ です。よって、積分は三角形の面積から

$$4\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\sin^2(\frac{T}{2}x)}{x^2} = \frac{1}{2}\frac{4\pi}{T}T^2 = 2\pi T$$

となります。

・補足 2

$J_{in} = |\boldsymbol{v}|/V$ をディラック方程式のカレントから求めます。カレントは

$$j^a = \overline{\phi}(x)\gamma^a\phi(x) \quad (a=1,2,3)$$

3 次元速度が必要なので 3 次元部分を取り出してます。ベクトルの向きを z 方向 ($a=3$) として、平面波を入れて、相対論的量子力学での「ディラック方程式」や「ディラック方程式の解〜別解〜」での結果を使って (σ_a はパウリ行列)

$$
\begin{aligned}
j^3 &= \frac{m}{EV}\overline{u}(p,s)\gamma^3 u(p,s) \\
&= \frac{m}{EV}\frac{E+m}{2m}(1\ 0\ \frac{p_3}{E+m}\ 0)\begin{pmatrix} 0 & \sigma_3 \\ \sigma_3 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{p_3}{E+m} \\ 0 \end{pmatrix} \\
&= \frac{m}{EV}\frac{E+m}{2m}(1\ 0\ \frac{p_3}{E+m}\ 0)\begin{pmatrix} \frac{p_3}{E+m} \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\
&= \frac{m}{EV}\frac{E+m}{2m}\frac{2p_3}{E_i+m} \\
&= \frac{p_3}{EV} \\
&= \frac{v_3}{V}
\end{aligned}
$$

最後に特殊相対論での速度 $|\boldsymbol{v}| = |\boldsymbol{p}|/E$ を使ってます。これは他の方向でも同様なので、j^a をフラックス $J_{in} = |\boldsymbol{j}|$ として

$$
J_{in} = \frac{|\boldsymbol{v}|}{V}
$$

となります。