S 行列

散乱の計算で出てくる S 行列を定義します。より細かい話は場の量子論の「S 行列」を見てください。
最後に微細構造定数の定義をしています。

入射粒子が何かのポテンシャル $V(\boldsymbol{x},t)$ に突っ込んで、散乱を受けてどこかに飛んでいくとします。このとき、ポテンシャルに到達する十分前の過去において、粒子はポテンシャルの影響を受けないと考えます。それを無限大の過去として、$V(\boldsymbol{x},t=-\infty)=0$ と与え、無限大の未来でも同様とします。この設定を反映させるために、ポテンシャル V に収束する係数をつけて

$$V(\boldsymbol{x},t) \ \Rightarrow\ e^{-\lambda|t|}V(\boldsymbol{x},t)$$

と置き換え ($\lambda>0$)、最後に $\lambda=0$ の極限を取ります。しかし、これは詳細に見なければ気にする必要がないことなので、無視します。

粒子の波動関数でも時間が無限大の場合を設定します。時間が $t=\pm\infty$ のときではポテンシャルの寄与は消えているので、$t=\pm\infty$ では平面波 ϕ が使えるとします。つまり、ポテンシャルに向かって行く入射波は平面波、散乱された後の $t=+\infty$ でも平面波になるとします。散乱前と散乱後の平面波を

$$\phi_i(x)=C\exp[-i(\omega_i t-\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{x})] \tag{1a}$$

$$\phi_f(x')=C\exp[-i(\omega_f t'-\boldsymbol{k}_f\cdot\boldsymbol{x}')] \tag{1b}$$

C は規格化定数です。

ポテンシャルの寄与を受けた散乱後の波動関数 ψ は「散乱でのグリーン関数」で示したように

$$\psi(x')=\phi(x')+\int d^4xG_0^+(x';x)V(x)\psi(x) \tag{2}$$

ϕ, G_0^+ は自由粒子の波動関数、遅延グリーン関数です。第 1 項が入射波、第 2 項が散乱波です。今知りたいのは、入射波 $\phi(\boldsymbol{x},t)$ が散乱を受けた後に無限大の時間後の未来での終状態 $\phi_f(\boldsymbol{x}',t')$ となる確率です。言い換えれば、散乱を受けた後の $\psi(\boldsymbol{x}',t')$ が無限大の時間後で $\phi_f(\boldsymbol{x}',t')$ となる遷移振幅 (確率振幅) です。ブラケットの式にすれば

$$S=\lim_{t'\to\infty}\langle\phi_f;t'|\psi_i;t'\rangle$$

これを S 行列や散乱行列と呼びます。ψ は入射波からの状態であることを表すために添え字に i をつけています。S 行列は求めたい対象そのものなので、量子論での重要な量の 1 つです。

位置の完全性を挟んで波動関数にして、(2) を使えば

$$\begin{aligned}
S&=\lim_{t'\to\infty}\int d^3x'\phi_f^*(\boldsymbol{x}',t')\big(\phi_i(\boldsymbol{x}',t')+\int d^4xG_0^+(\boldsymbol{x}',t';\boldsymbol{x},t)V(\boldsymbol{x},t)\psi_i(\boldsymbol{x},t)\big)\\
&=\lim_{t'\to\infty}\big(\int d^3x'\phi_f^*(\boldsymbol{x}',t')\phi_i(\boldsymbol{x}',t')+\int d^3x'd^4x\phi_f^*(\boldsymbol{x}',t')G_0^+(\boldsymbol{x}',t';\boldsymbol{x},t)V(\boldsymbol{x},t)\psi_i(\boldsymbol{x},t)\big)\\
&=\delta_{fi}+\lim_{t'\to\infty}\int d^3x'd^4x\phi_f^*(\boldsymbol{x}',t')G_0^+(\boldsymbol{x}',t';\boldsymbol{x},t)V(\boldsymbol{x},t)\psi_i(\boldsymbol{x},t)
\end{aligned} \tag{3}$$

波動関数の正規直交性によるクロネッカーデルタは (1a),(1b) の表記に対応しています。運動量を連続的に取るなら、$\delta^3(\boldsymbol{k}_f-\boldsymbol{k}_i)$ になります。また、平面波では $\omega^2=\boldsymbol{k}^2+m^2$ なので、$\boldsymbol{k}_f=\boldsymbol{k}_i$ で $\omega_i=\omega_f$ になるために $\exp[-i(\omega_i-\omega_f)t']$ は出てきません。

クロネッカーデルタは始状態と終状態の運動量 $\boldsymbol{k}_i,\boldsymbol{k}_f$ が等しければ 1 になると言っており、(3) の 2 行目から分かるように、クロネッカーデルタの項は散乱に関する情報を全く持っていません。また、これはポテンシャルがない時の 3 次元運動量の保存を表わしています。この情報はどうでもいいので (計算上も何の影響もない)、散乱問題を考える時は無視します。

というわけで、S 行列で重要なのは第 2 項です。しかし、厳密に求められないので摂動計算が使われており、それが非常に面倒です。

「伝播関数」で求めたディラック方程式の場合での S 行列を見ておきます。記号が重なりますが、S_F を伝播関数とします。粒子 (電子) に相当する $t\to\infty$ を見ます。始状態は

$$\psi_i(x')=\phi_i(x')+q\int d^4xS_F(x',x)\gamma^\mu A_\mu(x)\psi_i(x) \tag{4}$$

を使うことにし (A^μ は $\kappa_b^{-1}A^\mu$)、終状態はディラック方程式の平面波 $\phi_f(x)$ とします。q は電荷です。伝播関数はディラック方程式の平面波 $\phi^r_{\boldsymbol{p}}(x)$ から

$$S_F(x',x)=-i\Theta(t'-t)\int d^3p\sum_{r=1}^{2}\phi^r_{\boldsymbol{p}}(x')\overline{\phi}^r_{\boldsymbol{p}}(x)+i\Theta(t-t')\int d^3p\sum_{r=3}^{4}\phi^r_{\boldsymbol{p}}(x')\overline{\phi}^r_{\boldsymbol{p}}(x)$$

Θ は階段関数です。そうすると、S 行列は ϕ_f を粒子の終状態として

$$\begin{aligned}
S&=\lim_{t\to\infty}\langle\phi_f;t|\psi_i;t\rangle\\
&=\lim_{t\to\infty}\int d^3x\phi_f^*(x)\psi_i(x)\\
&=\lim_{t\to\infty}\int d^3x\phi_f^*(x)(\phi_i(x)+\int d^4yS_F(x,y)q\gamma^\mu A_\mu(y)\psi(y))\\
&=\delta_{fi}+\int d^3x\phi_f^*(x)\int d^3p\sum_{r=1}^{2}\phi^r_{\boldsymbol{p}}(x)\int d^4y(-iq\overline{\phi}^r_{\boldsymbol{p}}(y)\gamma^\mu A_\mu(y)\psi(y))\\
&=\delta_{fi}-iq\int d^4y\int d^3x\int d^3p\sum_{r=1}^{2}\phi_f^*(x)\phi^r_{\boldsymbol{p}}(x)\overline{\phi}^r_{\boldsymbol{p}}(y)\gamma^\mu A_\mu(y)\psi_i(y)
\end{aligned}$$

$\phi_f,\phi^r_{\boldsymbol{p}}$ はどちらも平面波なので同じものです。そして、$\boldsymbol{x}$ 積分、$\boldsymbol{p}$ 積分、r の和に関して正規直交性を持たすために $\phi^r_{\boldsymbol{p}}(x)=\phi_f(x)$ が要求され

$$S=\delta_{fi}-iq\int d^4y\overline{\phi}_f(y)\gamma^\mu A_\mu(y)\psi_i(y)$$

同様に ϕ_f が反粒子 (陽電子) の場合も作れますが、時間順序が逆になるので $t\to-\infty$ として

$$S=\lim_{t\to-\infty}\langle\phi_f;t|\psi_i;t\rangle=\delta_{fi}+iq\int d^4y\overline{\phi}_f(y)\gamma^\mu A_\mu(y)\psi_i(y)$$

第 2 項の符号が変わる点だけが異なっています。

S 行列に (4) を入れなおし続けると

$$
\begin{aligned}
S &= \delta_{fi} - iq\int d^4x_1 \overline{\phi}_f(x_1)\gamma^\mu A_\mu(x_1)\psi_i(x_1) \\
&= \delta_{fi} - iq\int d^4x_1 \overline{\phi}_f(x_1)\gamma^\mu A_\mu(x_1)\big(\phi_i(x_1) + q\int d^4x_2 S_F(x_1,x_2)\gamma^\nu A_\nu(x_2)\psi_i(x_2)\big) \\
&= \delta_{fi} - iq\int d^4x_1 \overline{\phi}_f(x_1)\gamma^\mu A_\mu(x_1)\phi_i(x_1) \\
&\quad - iq^2\int d^4x_1 d^4x_2 \overline{\phi}_f(x_1)\gamma^\mu A_\mu(x_1)S_F(x_1,x_2)\gamma^\nu A_\nu(x_2)\psi_i(x_2) \\
&= \delta_{fi} - iq\int d^4x_1 \overline{\phi}_f(x_1)\gamma^\mu A_\mu(x_1)\phi_i(x_1) \\
&\quad - iq^2\int d^4x_1 d^4x_2 \overline{\phi}_f(x_1)\gamma^\mu A_\mu(x_1)S_F(x_1,x_2)\gamma^\nu A_\nu(x_2) \\
&\qquad \times \big(\phi_i(x_2) + q\int d^4x_3 S_F(x_2,x_3)\gamma^\alpha A_\alpha(x_3)\psi_i(x_3)\big) \\
&= \delta_{fi} - iq\int d^4x_1 \overline{\phi}_f(x_1)\gamma^\mu A_\mu(x_1)\phi_i(x_1) \\
&\quad - iq^2\int d^4x_1 d^4x_2 \overline{\phi}_f(x_1)\gamma^\mu A_\mu(x_1)S_F(x_1,x_2)\gamma^\nu A_\nu(x_2)\phi_i(x_2) \\
&\quad - iq^3\int d^4x_1 d^4x_2 d^4x_3 \overline{\phi}_f(x_1)\gamma^\mu A_\mu(x_1)S_F(x_1,x_2)\gamma^\nu A_\nu(x_2)S_F(x_2,x_3)\gamma^\alpha A_\alpha(x_3)\psi_i(x_3)
\end{aligned}
$$

として、どこまでも続いていきます。q^n の項を取り出せば

$$
-iq^n\int d^4x_1 d^4x_2\cdots d^4x_n \overline{\phi}_f(x_1)\gamma^\mu A_\mu(x_1)S_F(x_1,x_2)\times\cdots\times\gamma^\alpha A_\alpha(x_{n-1})S_F(x_{n-1},x_n)\gamma^\beta A_\beta(x_n)\phi_i(x_n)
$$

このように展開すると自由粒子での波動関数と伝播関数で構成できます。これが QED での S 行列の摂動展開で、これを計算するのが目的となります。

S 行列を散乱断面積と関係させます。ある状態 $|\psi\rangle$ は $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ と規格化され、これは粒子が見つかることを意味します。このことから

$$
1 = \langle\psi|\psi\rangle = \int d^3p\langle\psi|\boldsymbol{p}\rangle\langle\boldsymbol{p}|\psi\rangle = \int d^3p|\langle\boldsymbol{p}|\psi\rangle|^2
$$

とすれば、$|\langle\boldsymbol{p}|\psi\rangle|^2$ は運動量 $\boldsymbol{p}$ での粒子が見つかる確率密度となり、$|\langle\boldsymbol{p}|\psi\rangle|^2d^3p$ は $\boldsymbol{p}$ から $\boldsymbol{p}+d\boldsymbol{p}$ の間に粒子がいる確率です。言い換えれば、$|\langle\boldsymbol{p}|\psi\rangle|^2$ は粒子数密度 (1 に規格化された) です。このことから、$|\langle\boldsymbol{p}|\psi\rangle|^2d^3p$ を粒子数と解釈します。そして、$|\psi\rangle$ を散乱を受けた後の状態、$\langle\boldsymbol{p}|$ を終状態とすれば、$\langle\boldsymbol{p}|\psi\rangle$ は S 行列になるので、粒子数は S^2d^3p となります。

次に散乱された粒子数を散乱断面積から作ります。ある 2 次元面 A があり、その内側に面 σ があるとします。この面 σ に粒子が当たる確率は、それぞれの面積を A,σ とすれば σ/A です。A の面積を 1 とすれば、面積 σ はそのまま当たる確率となります。この面 σ を通ったものが終状態になるとし、σ を散乱断面積と定義します。ここから散乱断面積は断面積と言っていきます。

面 A に向かって速度 $\boldsymbol{v}$ で密度 ρ の粒子が入射していくとすれば、面 A を通る粒子数は、T を通過時間として $\rho|\boldsymbol{v}|TA$ 個です ($|\boldsymbol{v}|T$ が高さ、A が底面となり、体積 $|\boldsymbol{v}|TA$)。これらの中で σ 内を通過していくのは $\sigma\rho|\boldsymbol{v}|T$ 個です。

というわけで、ρ と波動関数の規格化をそろえることで、断面積は S 行列によって

$$\sigma\rho|\boldsymbol{v}|T = S^2 d^3p$$

$$\sigma = \frac{S^2}{\rho|\boldsymbol{v}|T}d^3p$$

となります。$\rho|\boldsymbol{v}|$ はフラックス (単位時間、単位面積あたりの個数) で、ここではディラック方程式のカレントに対応します (「ラザフォード散乱」参照)。

運動量が離散的な場合では

$$1 = \langle\psi|\psi\rangle = \sum_n \langle\psi|\boldsymbol{p}_n\rangle\langle\boldsymbol{p}_n|\psi\rangle = \sum_n |\langle\boldsymbol{p}_n|\psi\rangle|^2$$

なので、S^2 は確率です。一辺が L の立方体での周期的境界条件の場合を見ておきます。平面波として、3 次元運動量は

$$p_i = \frac{2\pi n_i}{L} \quad (i = 1, 2, 3)$$

n_i は整数です。このため、$(2\pi)^3/L^3$ の間隔で可能な状態は並んでいて、$L^3/(2\pi)^3$ の密度で状態がいるので

$$N = \frac{L^3}{(2\pi)^3}\Delta p \quad (\Delta p = \Delta p_1 \Delta p_2 \Delta p_3)$$

とした N は $\boldsymbol{p}$ から $\boldsymbol{p} + \Delta\boldsymbol{p}$ の間の状態数です (自然単位系では運動量は長さの逆の次元)。このことから、$\Delta\boldsymbol{p}$ の幅で運動量 $\boldsymbol{p}$ を持つ終状態への遷移振幅は S^2N と言えます。よって、断面積は

$$\sigma = \frac{S^2 N}{\rho|\boldsymbol{v}|T}$$

また、L が十分大きければ、運動量は連続的と見なせるので、$d^3p = (2\pi)^3/L^3$ として

$$\frac{L^3}{(2\pi)^3}\sum_n f(\boldsymbol{p}_n)d^3p \ \Rightarrow \ \frac{L^3}{(2\pi)^3}\int d^3p\ f(\boldsymbol{p})$$

となり、積分の形と対応します ($L^3/(2\pi)^3$ は平面波での規格化)。

最後に、微細構造定数を定義しておきます。QED の計算では電子の素電荷 e の e^2 が基本的な量となります (上での e は e/κ_b)。CGS ガウス単位系では、$c, \hbar$ を 1 とせずに書けば

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137}$$

として、微細構造定数 α を定義します。ヘヴィサイド・ローレンツ単位系を使うなら

$$\alpha = \frac{1}{4\pi}\frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137}$$

CGS ガウスとヘヴィサイド・ローレンツでは

$$\frac{Q^2}{1[\mathrm{cm}^2]} = 1[\mathrm{cm}\cdot\mathrm{g/s}^2]\ ,\ \frac{1}{4\pi}\frac{Q^2}{1[\mathrm{cm}^2]} = 1[\mathrm{cm}\cdot\mathrm{g/s}^2]$$

となる電荷 Q を $1[\mathrm{stC}],\ 1[\mathrm{stC}/\sqrt{4\pi}]$ $(1[\mathrm{C}] \simeq 3\times 10^9[\mathrm{stC}])$ と定義しています。このため 4π だけ異なっています。

QED での主な計算対象は、α のオーダによって摂動展開されたものです。ちなみに、定数とついていますが、正確には定数ではないことがくり込みの結果から分かります。