# $S$ 行列

散乱計算で現れる $S$ 行列を見ていきます。ここでは形式的な話だけをします。

粒子が標的に向かって行き散乱するとします。それを記述するハミルトニアン演算子 $H$ は、自由粒子のハミルトニアン演算子 $H_0$ と相互作用項 (ポテンシャル項)$V$ に分解できるとします。散乱は $V$ によって表現されます。シュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi;t\rangle = H|\psi;t\rangle$$

から、状態の変化は時間 $t_0$ の状態を $|\psi;t_0\rangle$ として

$$|\psi;t\rangle = U(t,t_0)|\psi;t_0\rangle \quad (U(t,t_0) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar})$$

と表せます。つまり、$U(t,t_0)|\psi;t_0\rangle$ が古典論で言うところの粒子の軌道に対応します。

ここから $t_0 = 0$ とし、$|\psi\rangle = |\psi;t_0 = 0\rangle$ と表記します。$|\psi;t\rangle$ は散乱による状態を表すので、散乱が起きる前に巻き戻せば、散乱を起こす相互作用がない $H_0$ による状態になると考えられます。それを $H_0$ のシュレーディンガー方程式から

$$|\psi_{in};t\rangle = U_0(t)|\psi_{in}\rangle \quad (U_0(t) = e^{-iH_0t/\hbar})$$

として、$t\to-\infty$ で

$$\lim_{t\to-\infty}|\psi;t\rangle = \lim_{t\to-\infty}U(t)|\psi\rangle \ \Leftrightarrow\ \lim_{t\to-\infty}U_0(t)|\psi_{in}\rangle \quad (U_0(t) = e^{-iH_0t/\hbar})$$

と対応させます。$|\psi_{in}\rangle$ は時間独立な任意の状態です。同様に、散乱後も自由粒子の状態になるとして

$$\lim_{t\to+\infty}|\psi;t\rangle = \lim_{t\to+\infty}U(t)|\psi\rangle \ \Leftrightarrow\ \lim_{t\to+\infty}U_0(t)|\psi_{out}\rangle$$

このように、散乱を起こす状態 $|\psi;t\rangle$ の漸近的な状態として $|\psi_{in}\rangle, |\psi_{out}\rangle$ を与えます。つまり、漸近的条件として

$$\lim_{t\to-\infty}(|\psi;t\rangle - |\psi_{in};t\rangle) = 0\ ,\ \lim_{t\to+\infty}(|\psi;t\rangle - |\psi_{out};t\rangle) = 0$$

が与えられています。古典的に言えば、$|\psi;t\rangle$ は散乱による軌道、$|\psi_{in};t\rangle, |\psi_{out};t\rangle$ は散乱のない軌道で、$|\psi;t\rangle$ は $t\to\pm\infty$ で漸近的に $|\psi_{in};t\rangle, |\psi_{out};t\rangle$ の軌道に近づくということです。

これらの極限において

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \lim_{t\to-\infty}U^\dagger(t)U_0(t)|\psi_{in}\rangle = \Omega_+|\psi_{in}\rangle \\
|\psi\rangle &= \lim_{t\to+\infty}U^\dagger(t)U_0(t)|\psi_{out}\rangle = \Omega_-|\psi_{out}\rangle \qquad (1)
\end{aligned}$$

演算子 $\Omega_\pm$ を M$\o$ller wave operator と呼びます (極限が存在する例を下の補足で示しています)。そして、散乱を含む $|\psi\rangle$ はどちらでも同じになるとして

$$|\psi\rangle = \Omega_+|\psi_{in}\rangle = \Omega_-|\psi_{out}\rangle \tag{2}$$

とします。$\Omega_\pm$ はユニタリー演算子ではないことに注意してください。

古典的な場合もそうであるように、$V$ が空間全てにそれなりの大きさで存在していると、$|\psi;t\rangle$ は $V$ のない場合に漸近的に近づきません。このため、漸近的に近づくためには $V$ に制限が入ります。そんな制限に触れても面倒なだけなので、$V$ は距離 $r$ の増加に対して急激に減少すると仮定してしまいます。細かく言うと、$r\to\infty$ では $r^{-3}$ より早く 0 に近づき、$r\to 0$ では $r^{-3/2}$ より遅く発散すればいいです。さらに言えば、(2) を満たす $V$ でなければいけないですが、ここら辺は数学の話なので無視します (漸近完全性, asymptotic completeness)。

$\Omega_\pm$ は定義から $\Omega_\pm^\dagger\Omega_\pm = 1$ なので

$$|\psi_{out}\rangle = \Omega_-^\dagger\Omega_+|\psi_{in}\rangle = S|\psi_{in}\rangle$$

これから、入射粒子の状態を $|\psi_{in}\rangle$、散乱後の終状態を $|\psi_{out}\rangle$ とすれば、演算子 $S$ が散乱の情報を全て持ちます。$S$ を $S$ 行列演算子と呼び、次に見るように「相互作用描像」での $S$ 行列と同じものです。また、$S=1$ なら等号になるので、何も起きていないことになります。

相互作用のない入射粒子の始状態を $|\psi_{in}\rangle$、散乱後の終状態を $|\phi_{out}\rangle$ とします。散乱を含む状態とは

$$|\psi_+\rangle = \Omega_+|\psi_{in}\rangle\ ,\ |\phi_-\rangle = \Omega_-|\phi_{out}\rangle$$

$|\psi_\pm\rangle$ は適当な時間 (今は $t=t_0=0$) での状態です。なので、入射粒子の始状態 $|\psi_{in}\rangle$ から発展した $|\psi_+\rangle$ が、設定した終状態から発展した $|\phi_-\rangle$ になる確率が知りたい量です (散乱のない始状態から散乱を受ける状態へ発展させたものと、散乱のない終状態から散乱を受ける状態へ巻き戻していったものとが対応する確率)。その確率は

$$|\langle\phi_-|\psi_+\rangle|^2 = |\langle\phi_{out}|\Omega_-^\dagger\Omega_+|\psi_{in}\rangle|^2 = |\langle\phi_{out}|S|\psi_{in}\rangle|^2$$

となり、$S$ 行列演算子の成分そのものです。

$\Omega_\pm$ とハミルトニアン演算子の関係を求めます。$e^{iHt/\hbar}\Omega_\pm$ は

$$\begin{aligned}
e^{iHt'/\hbar}\Omega_\pm &= e^{iHt'/\hbar}\lim_{t\to\mp\infty}e^{iHt/\hbar}e^{-iH_0t/\hbar}\\
&= \lim_{t\to\mp\infty}e^{iH(t+t')/\hbar}e^{-iH_0t/\hbar}\\
&= (\lim_{t\to\mp\infty}e^{iH(t+t')/\hbar}e^{-iH_0(t+t')/\hbar})e^{iH_0t'/\hbar}\\
&= \Omega_\pm e^{iH_0t'/\hbar}
\end{aligned}$$

$t'$ で微分すれば

$$\frac{i}{\hbar}He^{iHt'/\hbar}\Omega_\pm = \Omega_\pm\frac{i}{\hbar}H_0e^{iH_0t'/\hbar}$$

$$He^{iHt'/\hbar}\Omega_\pm = \Omega_\pm H_0e^{iH_0t'/\hbar}$$

$t'=0$ で、$H\Omega_\pm = \Omega_\pm H_0$ となり

$$\Omega_\pm^\dagger H\Omega_\pm = H_0 \tag{3}$$

という関係になります。

$S$ 行列の定義は相互作用描像での時間発展演算子の極限に対応します。それを見るために、$\Omega_\pm$ と $|\psi_{in}\rangle, |\psi_{out}\rangle$ を相互作用描像で書きます。まず、時間発展演算子 $U_I$ は

$$U_I(0,t) = \hat{U}_0^\dagger(0,t_0)\hat{U}(0,t)U_0(t,t_0)$$

なので、$\Omega_\pm$ は

$$\begin{aligned}
\Omega_+ &= \lim_{t\to-\infty}U^\dagger(t)U_0(t) = \lim_{t\to-\infty}U_0^\dagger(0,0)U(0,t)U_0(t,0) = U_I(0,-\infty)\\
\Omega_- &= \lim_{t\to+\infty}U^\dagger(t)U_0(t) = U_I(0,+\infty)
\end{aligned}$$

となります。シュレーディンガー描像の状態 $|\psi_{in};t\rangle_S$ の相互作用描像は

$$|\psi_{in};t\rangle_I = e^{iH_0t/\hbar}|\psi_{in};t\rangle_S = e^{iH_0t/\hbar}e^{-iH_0t/\hbar}|\psi_{in}\rangle = |\psi_{in}\rangle$$

時間独立なので、$t\to-\infty$ として

$$\lim_{t\to-\infty}|\psi;t\rangle_I = |\psi_{in}\rangle$$

$|\psi_{out}\rangle$ でも同様に

$$\lim_{t\to+\infty}|\psi;t\rangle_I = |\psi_{out}\rangle$$

そうすると、始状態からの $t=0$ の状態 $|\psi_+\rangle$ と終状態からの $t=0$ での状態 $|\phi_-\rangle$ は

$$\begin{aligned}
\langle\phi_-|\psi_+\rangle &= \langle\phi_{out}|\Omega_-^\dagger\Omega_+|\psi_{in}\rangle\\
&= {}_I\langle\phi;+\infty|U_I^\dagger(0,\infty)U_I(0,-\infty)|\psi;-\infty\rangle_I\\
&= {}_I\langle\phi;+\infty|U_I(+\infty,0)U_I(0,-\infty)|\psi;-\infty\rangle_I
\end{aligned}$$

と書けるので、$S$ 行列演算子は、相互作用描像の時間発展演算子によって

$$S = U_I(+\infty, 0)U_I(0, -\infty) = U_I(+\infty, -\infty)$$

となります。

「相互作用描像」で求めた $U_I$ を使えば

$$\begin{aligned}
S &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} S^{(n)} \\
&= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!}(\frac{-i}{\hbar})^n \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n \mathrm{T}[V_I(t_1)V_I(t_2)\cdots V_I(t_n)] \\
&= \mathrm{T}\big[\exp[-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} ds\ V_I(s)]\big]
\end{aligned}$$

1 は散乱が起きない場合に対応します。これを運動量の固有状態で挟めば

$$\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{p}_2|S|\boldsymbol{p}_1\rangle &= \delta^3(\boldsymbol{p}_2 - \boldsymbol{p}_1) + \langle \boldsymbol{p}_2|S^{(1)}|\boldsymbol{p}_1\rangle + \langle \boldsymbol{p}_2|S^{(2)}|\boldsymbol{p}_1\rangle + \cdots \qquad (\langle \boldsymbol{p}_2|\boldsymbol{p}_1\rangle = \delta^3(\boldsymbol{p}_2 - \boldsymbol{p}_1)) \\
&= \delta^3(\boldsymbol{p}_2 - \boldsymbol{p}_1) \\
&\quad + \frac{-i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \langle \boldsymbol{p}_2|V_I(t_1)|\boldsymbol{p}_1\rangle + \frac{1}{2}(\frac{-i}{\hbar})^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \langle \boldsymbol{p}_2|\mathrm{T}[V_I(t_1)V_I(t_2)]|\boldsymbol{p}_1\rangle + \cdots \\
&= \delta^3(\boldsymbol{p}_2 - \boldsymbol{p}_1) \\
&\quad + \frac{-i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \langle \boldsymbol{p}_2|V_I(t_1)|\boldsymbol{p}_1\rangle + (\frac{-i}{\hbar})^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \langle \boldsymbol{p}_2|V_I(t_1)V_I(t_2)|\boldsymbol{p}_1\rangle + \cdots \qquad (4)
\end{aligned}$$

運動量で挟むのは、始状態 $|\psi_{in}\rangle$ と散乱後の状態 $|\psi_{out}\rangle$ の関係において

$$\psi_{out}(\boldsymbol{p}_2) = \langle \boldsymbol{p}_2|S|\psi_{in}\rangle = \int d^3p_1 \langle \boldsymbol{p}_2|S|\boldsymbol{p}_1\rangle\langle \boldsymbol{p}_1|\psi_{in}\rangle = \int d^3p_1 \langle \boldsymbol{p}_2|S|\boldsymbol{p}_1\rangle \psi_{in}(\boldsymbol{p})$$

と現れるからです。後は具体的な相互作用 $V$ を使って計算します。$S^{(1)}$ までを計算することをボルン (Born) 近似と呼びます。

$S^{(1)}$ は、$E_{1,2} = \boldsymbol{p}_{1,2}^2/2m$ として、デルタ関数を使えば

$$
\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{p}_2|S^{(1)}|\boldsymbol{p}_1\rangle &= \frac{-i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \langle \boldsymbol{p}_2|V_I(t_1)|\boldsymbol{p}_1\rangle \\
&= \frac{-i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \langle \boldsymbol{p}_2|e^{iH_0t_1/\hbar}Ve^{-iH_0t_1/\hbar}|\boldsymbol{p}_1\rangle \\
&= \frac{-i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt_1 e^{i(E_2-E_1)t_1/\hbar}\langle \boldsymbol{p}_2|V|\boldsymbol{p}_1\rangle \\
&= \frac{-i}{\hbar}2\pi\delta(\frac{E_2-E_1}{\hbar})\langle \boldsymbol{p}_2|V|\boldsymbol{p}_1\rangle \\
&= -i2\pi\delta(E_2-E_1)\langle \boldsymbol{p}_2|V|\boldsymbol{p}_1\rangle \quad (\delta(ax)=\frac{1}{|a|}\delta(x))
\end{aligned} \tag{5}
$$

$V$ は $V(\boldsymbol{x})$ とし位置演算子が位置 $\boldsymbol{x}$ になるだけとして、位置の完全性を挟めば

$$
\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{p}_2|S^{(1)}|\boldsymbol{p}_1\rangle &= -i2\pi\delta(E_2-E_1)\int d^3x \langle \boldsymbol{p}_2|V|\boldsymbol{x}\rangle\langle \boldsymbol{x}|\boldsymbol{p}_1\rangle \\
&= -i2\pi\delta(E_2-E_1)\int d^3x\ V(\boldsymbol{x})e^{-i\boldsymbol{p}_2\cdot\boldsymbol{x}/\hbar}e^{i\boldsymbol{p}_1\cdot\boldsymbol{x}/\hbar} \quad (\langle \boldsymbol{x}|\boldsymbol{p}\rangle = e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar}) \\
&= -i2\pi\delta(E_2-E_1)\int d^3x\ V(\boldsymbol{x})e^{-i(\boldsymbol{p}_2-\boldsymbol{p}_1)\cdot\boldsymbol{x}/\hbar}
\end{aligned}
$$

例えば、$V(\boldsymbol{x})$ が $V(r)$ $(r=|\boldsymbol{x}|)$ となっているなら

$$
\begin{aligned}
\int d^3x\ V(r)e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar} &= 2\pi\int_0^{\infty} dr\ V(r)\int_0^{\pi} d\theta\ r^2e^{-i|\boldsymbol{q}|r\cos\theta}\sin\theta \quad (\boldsymbol{q}=\frac{\boldsymbol{p}_2-\boldsymbol{p}_1}{\hbar}) \\
&= -2\pi\frac{1}{i}\int_0^{\infty} dr\ V(r)\int_{i|\boldsymbol{q}|r}^{-i|\boldsymbol{q}|r} ds\ \frac{r}{|\boldsymbol{q}|}e^{-s} \quad (s=i|\boldsymbol{q}|r\cos\theta,\ ds=-i|\boldsymbol{q}|r\sin\theta d\theta) \\
&= 2\pi\frac{1}{i}\int_0^{\infty} dr\ V(r)\frac{r}{|\boldsymbol{q}|}(\exp[\frac{i}{\hbar}|\boldsymbol{q}|r]-\exp[-\frac{i}{\hbar}|\boldsymbol{q}|r]) \\
&= 4\pi\int_0^{\infty} dr\ V(r)\frac{r}{|\boldsymbol{q}|}\sin(|\boldsymbol{q}|r)
\end{aligned}
$$

となります。

また、(4),(5) のようになることは、(3) から求められます。運動量の固有状態 $|\boldsymbol{p}_1\rangle, |\boldsymbol{p}_2\rangle$ に対して、(3) を使うと

$$
\langle \boldsymbol{p}_2|[H_0,S]|\boldsymbol{p}_1\rangle = \langle \boldsymbol{p}_2|(H_0S-SH_0)|\boldsymbol{p}_1\rangle = \langle \boldsymbol{p}_2|(E_2S-SE_1)|\boldsymbol{p}_1\rangle = (E_2-E_1)\langle \boldsymbol{p}_2|S|\boldsymbol{p}_1\rangle
$$

$E_1, E_2$ は運動量 $\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2$ に対応する $H_0$ のエネルギーです。$H_0$ と $S$ は交換するので、これは 0 です。なので、$\langle \boldsymbol{p}_2|S|\boldsymbol{p}_1\rangle \neq 0$ となるのは $E_2=E_1$ のときで、これはエネルギー保存です。このことをデルタ関数で表すことにし、適当な関数 $f$ によって

$$
\langle \boldsymbol{p}_2|S|\boldsymbol{p}_1\rangle = \delta^3(\boldsymbol{p}_2-\boldsymbol{p}_1) - 2\pi i\delta(E_1-E_2)f(\boldsymbol{p}_2;\boldsymbol{p}_1)
$$

と書けます。第二項の $-2\pi i$ は (5) のように出てくるからです。

実験結果との比較は散乱断面積によって与えられるので、運動量表示での $S$ 行列と散乱断面積との関係を求めます。運動量 $\boldsymbol{p}$ を持つ始状態を $\psi_{in}(\boldsymbol{p}) = \langle \boldsymbol{p} | \psi_{in} \rangle$ とし、これはガウス分布のようにある運動量付近で大きな値を持つ波束とします (運動量を十分決められる程に鋭い)。この粒子を標的に向かわせて散乱させます。しかし、実験では完全に同じ状態を使い続けることはできないので、この状態に対して衝突パラメータ $\boldsymbol{b}$ の範囲にいる状態を入射粒子とします。$\boldsymbol{b}$ は粒子の進行方向に対して垂直なので、進行方向に直交する 2 次元面のベクトルです。位置のズレは運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{p}}$ で与えられるので、$\phi(\boldsymbol{p}) = \langle \boldsymbol{p} | \phi \rangle$ から $\boldsymbol{b}$ だけズレている状態は

$$\phi_b(\boldsymbol{p}) = e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar}\psi_{in}(\boldsymbol{p})$$

となります。

また、平面波でも同様の関係が導けるので、波束としないことも多いです。実験との対応を考えるなら波束を使ったほうが良いですし、数学の面からも波束のほうが便利です

ある衝突パラメータ $\boldsymbol{b}_0$ の入射粒子が散乱して観測したい状態になる確率を $P(\boldsymbol{b}_0)$ とします。単位面積あたりに粒子数 (面積密度)$n$ で微小な面 $\Delta s$ を通っていく入射粒子を散乱させたとき、観測される散乱の回数は $n\Delta s P(\boldsymbol{b}_0)$ です。今は衝突パラメータによる 2 次元面を通過する粒子を扱うので、全体の散乱回数 $N$ は

$$N = n\int d^2b\ P(\boldsymbol{b})$$

入射粒子は衝突パラメータに依存せずに一様に分布するとして（粒子分布に偏りがないとする)、$n$ は積分の外に出しています。

散乱断面積 $\sigma$ は $n$ によって

$$\sigma = \frac{N}{n}$$

と定義されます。ただし、標的は 1 個としています。この定義の意味を簡単に言っておきます。体積密度 $\rho$ の入射粒子が、時間 $T$ の間に面積 $s$ の幅で標的に向かって行くとします ($v$ は標的と入射粒子の相対速度)。このとき、散乱を起こす可能性がある粒子の個数は $\rho vTs$ 個です (標的に対して $vT$ 内の距離にいる粒子)。なので、標的によって 1 回散乱される確率を $\sigma'$ とすれば、$\rho vTs\sigma'$ 回散乱が起きます。よって、面積の次元を持つ $\sigma = s\sigma'$ として、全体の散乱回数 $N$ は

$$\begin{aligned}
N &= \sigma\rho vT \\
&= \sigma\frac{\rho V}{s} \qquad (V = vTs) \\
&= \sigma n \\
\sigma &= \frac{N}{n}
\end{aligned}$$

となります。このように、散乱断面積は入射粒子が散乱される断面積における確率です。

$P$ は散乱後に運動量 $\boldsymbol{k}$ の状態 $\psi_{out}(\boldsymbol{k}) = \langle \boldsymbol{k} | \psi_{out} \rangle$ になる確率と言えます。この状態が存在する確率は

$$|\psi_{out}(\boldsymbol{k})|^2 d^3k$$

どの運動量で散乱されてくるかは考えずに、散乱してくる角度を見ます。つまり、散乱されてくる運動量の大きさ $|\boldsymbol{k}|$ は全て足し合わせて、散乱していく 3 次元角度 (立体角)$d\Omega$ を残します (運動量の角度であることに注意)。そうすると、3 次元運動量積分として

$$P = d\Omega\int_0^\infty dk\ |\boldsymbol{k}||\psi_{out}(\boldsymbol{k})|^2$$

$\psi_{out}$ は $S$ 行列を使うと

$$\begin{aligned}\psi_{out}(\boldsymbol{k}) = &\int d^3p\langle\boldsymbol{k}|S|\boldsymbol{p}\rangle\psi_{in}(\boldsymbol{p})\\ = &\int d^3p\delta^3(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p})\psi_{in}(\boldsymbol{p}) - 2\pi i\int d^3p\delta(E_{\boldsymbol{p}}-E_{\boldsymbol{k}})f(\boldsymbol{k};\boldsymbol{p})\psi_{in}(\boldsymbol{p})\\ = &\ \psi_{in}(\boldsymbol{k}) - 2\pi i\int d^3p\delta(E_{\boldsymbol{p}}-E_{\boldsymbol{k}})f(\boldsymbol{k};\boldsymbol{p})\psi_{in}(\boldsymbol{p})\end{aligned}$$

波束 $\psi_{in}$ は十分鋭いとしているので、散乱後の運動量 $\boldsymbol{k}$ は鋭い地点からズレるはずなので (入射粒子の運動量は散乱によって変化する)、$\psi_{in}(\boldsymbol{k})$ はほぼ 0 になるとして

$$\begin{aligned}P = (2\pi)^2 d\Omega\int_0^\infty dk\ |\boldsymbol{k}|\int d^3p\delta(E_{\boldsymbol{p}}-E_{\boldsymbol{k}})f(\boldsymbol{k};\boldsymbol{p})\psi_{in}(\boldsymbol{p})\\ \times\int d^3p'\delta(E_{\boldsymbol{p}'}-E_{\boldsymbol{k}})f^*(\boldsymbol{k};\boldsymbol{p}')\psi^*_{in}(\boldsymbol{p}')\end{aligned}$$

$\psi_{in}(\boldsymbol{p})$ に衝突パラメータによる $e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{b}}$ を加えて

$$\begin{aligned}P(\boldsymbol{b}) = (2\pi)^2 d\Omega\int_0^\infty dk\ |\boldsymbol{k}|\int d^3p\delta(E_{\boldsymbol{p}}-E_{\boldsymbol{k}})f(\boldsymbol{k};\boldsymbol{p})\phi_b(\boldsymbol{p})\\ \times\int d^3p'\delta(E_{\boldsymbol{p}'}-E_{\boldsymbol{k}})f^*(\boldsymbol{k};\boldsymbol{p}')\phi^*_b(\boldsymbol{p}')\end{aligned}$$

よって

$$\begin{aligned}N = (2\pi)^2 n d\Omega\int d^2b\int_0^\infty dk\ |\boldsymbol{k}|\int d^3p\delta(E_{\boldsymbol{p}}-E_{\boldsymbol{k}})f(\boldsymbol{k};\boldsymbol{p})\phi_b(\boldsymbol{p})\\ \times\int d^3p'\delta(E_{\boldsymbol{p}'}-E_{\boldsymbol{k}})f^*(\boldsymbol{k};\boldsymbol{p}')\phi^*_b(\boldsymbol{p}')\end{aligned}$$

積分を実行していきます。

$b$ 積分は

$$\int d^2be^{-i(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{b}}$$

これは 2 次元のデルタ関数の定義そのもので、$\boldsymbol{b}$ は粒子の進行方向に直交しているので

$$\int d^2 b e^{-i(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{b}} = (2\pi)^2\delta^2(\boldsymbol{p}_\perp - \boldsymbol{p}'_\perp)$$

「⊥」は進行方向に直交する成分を表します。例えば、進行方向が $x$ 軸方向なら、$\boldsymbol{p}_\perp$ は $y, z$ 成分です。

エネルギーのデルタ関数は $\delta(E_{\boldsymbol{p}} - E_{\boldsymbol{k}})\delta(E_{\boldsymbol{p}'} - E_{\boldsymbol{k}})$ なので、片方を $\delta(E_{\boldsymbol{p}} - E_{\boldsymbol{p}'})$ に出来ます。そして、エネルギーは自由粒子に対応しているので

$$\delta(E_{\boldsymbol{p}} - E_{\boldsymbol{p}'}) = \delta(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} - \frac{\boldsymbol{p}'^2}{2m}) = 2m\delta(\boldsymbol{p}^2 - \boldsymbol{p}'^2) \quad (\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x))$$

垂直成分は $\boldsymbol{p}_\perp = \boldsymbol{p}'_\perp$ なので、残りの平行な成分を $\boldsymbol{p}_/$ とすれば (2 次元の垂直成分と 1 次元の平行成分に分解する)、デルタ関数は $f(\alpha) = 0$ となる $\alpha = \alpha_i$ $(i = 1, 2, , \ldots, n)$ に対して

$$\delta(f(\alpha)) = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{|df/d\alpha|_{\alpha=\alpha_i}}\delta(\alpha - \alpha_i)$$

となることを使って

$$\begin{aligned}
\delta(\boldsymbol{p}^2 - \boldsymbol{p}'^2) = \delta(\boldsymbol{p}_\perp^2 + \boldsymbol{p}_/^2 - (\boldsymbol{p}'^2_\perp + \boldsymbol{p}'^2_/)) = \delta(\boldsymbol{p}_/^2 - \boldsymbol{p}'^2_/) &= \delta((|\boldsymbol{p}_/| - |\boldsymbol{p}'_/|)(|\boldsymbol{p}_/| + |\boldsymbol{p}'_/|)) \\
&= \frac{1}{2|\boldsymbol{p}_/|}(\delta(|\boldsymbol{p}_/| - |\boldsymbol{p}'_/|) + \delta(|\boldsymbol{p}_/| + |\boldsymbol{p}'_/|))
\end{aligned}$$

$\psi_{in}(\boldsymbol{p})$ は十分鋭い波束としているので、$|\boldsymbol{p}_/| = -|\boldsymbol{p}'_/|$ では例えば $|\boldsymbol{p}'_/| = +c$ で最大値となるなら、$|\boldsymbol{p}_/| < 0$ はほぼ 0 の領域のみになります。なので、第二項は無視します。

というわけで、デルタ関数は

$$\delta^2(\boldsymbol{p}_\perp - \boldsymbol{p}'_\perp)\delta(E_{\boldsymbol{p}} - E_{\boldsymbol{p}'}) = 2m\delta^2(\boldsymbol{p}_\perp - \boldsymbol{p}'_\perp)\delta(\boldsymbol{p}^2 - \boldsymbol{p}'^2) = \frac{m}{|\boldsymbol{p}_/|}\delta^3(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}')$$

となるので

$$\begin{aligned}
N &= (2\pi)^4 n d\Omega \int_0^\infty dk\ |\boldsymbol{k}| \int d^3p \int d^3p' \delta^2(\boldsymbol{p}_\perp - \boldsymbol{p}'_\perp)\delta(E_{\boldsymbol{p}} - E_{\boldsymbol{k}})\delta(E_{\boldsymbol{p}'} - E_{\boldsymbol{k}}) \\
&\qquad \times f(\boldsymbol{k}; \boldsymbol{p})\psi_{in}(\boldsymbol{p})f^*(\boldsymbol{k}; \boldsymbol{p}')\psi_{in}^*(\boldsymbol{p}') \\
&= (2\pi)^4 n d\Omega \int_0^\infty dk\ |\boldsymbol{k}| \int d^3p \int d^3p' \frac{m}{|\boldsymbol{p}_/|}\delta^3(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}')\delta(E_{\boldsymbol{p}} - E_{\boldsymbol{k}}) \\
&\qquad \times f(\boldsymbol{k}; \boldsymbol{p})\psi_{in}(\boldsymbol{p})f^*(\boldsymbol{k}; \boldsymbol{p}')\psi_{in}^*(\boldsymbol{p}') \\
&= (2\pi)^4 n d\Omega \int_0^\infty dk\ |\boldsymbol{k}|^2 \int d^3p \frac{m}{|\boldsymbol{p}_/|}\delta(E_{\boldsymbol{p}} - E_{\boldsymbol{k}})|f(\boldsymbol{k}; \boldsymbol{p})\psi_{in}(\boldsymbol{p})|^2
\end{aligned}$$

$k$ 積分は

$$\delta(E_{\boldsymbol{p}} - E_{\boldsymbol{k}}) = 2m\delta(\boldsymbol{p}^2 - \boldsymbol{k}^2) = \frac{m}{|\boldsymbol{p}|}(\delta(|\boldsymbol{p}| - |\boldsymbol{k}|) + \delta(|\boldsymbol{p}| + |\boldsymbol{k}|))$$

なので

$$\begin{aligned} N &= nd\Omega \int d^3p \frac{|\boldsymbol{p}|}{|\boldsymbol{p}_{/}|} |(2\pi)^2 mf(\boldsymbol{k};\boldsymbol{p})\psi_{in}(\boldsymbol{p})|^2 \\ &= nd\Omega \int d^3p \frac{|\boldsymbol{p}|}{|\boldsymbol{p}_{/}|} |F(\boldsymbol{k};\boldsymbol{p})\psi_{in}(\boldsymbol{p})|^2 \quad (F(\boldsymbol{k};\boldsymbol{p}) = (2\pi)^2 mf(\boldsymbol{k};\boldsymbol{p})) \end{aligned}$$

最後の $F(\boldsymbol{k};\boldsymbol{p})$ での $\boldsymbol{k},\boldsymbol{p}$ は $|\boldsymbol{k}| = |\boldsymbol{p}|$ です。さらに、波束は最大値となる $\boldsymbol{p} = \boldsymbol{p}_0$ 付近だけで大きな値を持つので ($\boldsymbol{p}_{/}$ は衝突パラメータに垂直な成分なので粒子の進行方向、波束の最大値となる $\boldsymbol{p}_0$ は粒子の進行方向)。

$$\frac{|\boldsymbol{p}|}{|\boldsymbol{p}_{/}|} \ \Rightarrow \ 1 \ , \ F(\boldsymbol{k};\boldsymbol{p}) \ \Rightarrow \ F(\boldsymbol{k};\boldsymbol{p}_0)$$

として

$$N = n|F(\boldsymbol{k};\boldsymbol{p}_0)|^2 d\Omega \int d^3p |\psi_{in}(\boldsymbol{p})|^2 = n|F(\boldsymbol{k};\boldsymbol{p}_0)|^2 d\Omega$$

波動関数の規格化を使っています。よって、散乱断面積は

$$\sigma = \frac{N}{n} = |F(\boldsymbol{k};\boldsymbol{p}_0)|^2 d\Omega$$

微小な立体角 $d\Omega$ との割合とすれば

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |F(\boldsymbol{k};\boldsymbol{p}_0)|^2$$

これは微分断面積です。この結果は、波束は十分鋭く、$|F(\boldsymbol{k};\boldsymbol{p})|^2$ を定数と出来る場合です。

**・補足**

(1) の例を示します。$U^\dagger U_0$ の微分は

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(U^\dagger(t)U_0(t)) &= \frac{i}{\hbar}HU^\dagger U_0 - \frac{i}{\hbar}U^\dagger H_0 U_0 \\ &= \frac{i}{\hbar}U^\dagger H U_0 - \frac{i}{\hbar}U^\dagger H_0 U_0 \\ &= \frac{i}{\hbar}U^\dagger(H - H_0)U_0 \\ &= \frac{i}{\hbar}U^\dagger V U_0 \end{aligned}$$

0 から $t$ で両辺を積分して

$$U^\dagger(t)U_0(t) - U^\dagger(0)U_0(0) = \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' U^\dagger(t')VU_0(t')$$

$$U^\dagger(t)U_0(t) = 1 + \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' U^\dagger(t')VU_0(t') \quad (U(t,t) = U_0(t,t) = 1)$$

これを $|\psi_{in}\rangle$ に作用させれば

$$U^\dagger(t)U_0(t)|\psi_{in}\rangle = |\psi_{in}\rangle + \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' U^\dagger(t')VU_0(t')|\psi_{in}\rangle \tag{6}$$

右辺第二項の積分が $t\to-\infty$ で収束していれば、左辺の $t\to-\infty$ の極限が存在します。

$\langle \boldsymbol{x}|\psi_{in};t\rangle$ をガウス型の波束として (「波束」参照。3 次元なので 3 個分の積を取っている)

$$\langle \boldsymbol{x}|\psi_{in};t\rangle = \langle \boldsymbol{x}|U_0(t)|\psi_{in}\rangle = (1+i\frac{\hbar t}{ma^2})^{-3/2}\exp[\frac{\boldsymbol{x}^2}{2a^2(1+i\hbar t/ma^2)}]$$

規格化定数は省いています。これの絶対値は

$$|\langle \boldsymbol{x}|U_0(t)|\psi_{in}\rangle|^2 = (1+\frac{\hbar^2t^2}{m^2a^4})^{-3/2}\exp[\frac{\boldsymbol{x}^2}{2a^2}(\frac{1}{1+i\hbar t/ma^2}+\frac{1}{1-i\hbar t/ma^2})]$$
$$= (1+\frac{\hbar^2t^2}{m^2a^4})^{-3/2}\exp[-\frac{\boldsymbol{x}^2}{a^2+\hbar^2t^2/m^2a^2}]$$

そして

$$|U^\dagger VU_0|\phi\rangle|^2 = \langle\phi|(U^\dagger VU_0)^\dagger U^\dagger VU_0|\phi\rangle = \langle\phi|U_0^\dagger VUU^\dagger VU_0|\phi\rangle = \langle\phi|U_0VVU_0|\phi\rangle = |VU_0|\phi\rangle|^2$$

となるので、(6) の第二項において

$$|VU_0|\psi_{in}\rangle|^2 = \langle\psi_{in}|U_0VVU_0|\psi_{in}\rangle$$
$$= \int d^3x\langle\psi_{in}|U_0VV|\boldsymbol{x}\rangle\langle\boldsymbol{x}|U_0|\psi_{in}\rangle$$
$$= \int d^3x|V(\boldsymbol{x})|^2\langle\psi_{in}|U_0|\boldsymbol{x}\rangle\langle\boldsymbol{x}|U_0|\psi_{in}\rangle$$
$$= \int d^3x|V(\boldsymbol{x})|^2\ |\langle\boldsymbol{x}|U_0|\psi_{in}\rangle|^2$$
$$= (1+\frac{\hbar^2t^2}{m^2a^4})^{-3/2}\int d^3x|V(\boldsymbol{x})|^2\exp[-\frac{\boldsymbol{x}^2}{a^2+\hbar^2t^2/m^2a^2}]$$

exp 部分は 1 以下なので

$$|VU_0|\psi\rangle_{in}|^2 \leq (1+\frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4})^{-3/2}\int d^3x|V(\boldsymbol{x})|^2$$

$V(\boldsymbol{x})$ は $\pm\infty$ で十分早く 0 に近づくとすれば

$$\int_{-\infty}^{0} dt'|VU_0(t')|\psi\rangle_{in}| \leq \sqrt{I}\int_{-\infty}^{0} dt'(1+\frac{\hbar^2 t'^2}{m^2 a^4})^{-3/2}$$

$I$ は $|V(\boldsymbol{x})|^2$ 積分部分です。右辺の $t'$ 積分は発散しないので、左辺の積分は収束します。よって、

$$\lim_{t\to-\infty} U^\dagger(t)U_0(t)|\psi\rangle_{in} = |\psi\rangle_{in} + \frac{i}{\hbar}\lim_{t\to-\infty}\int_0^t dt'U^\dagger(t')VU_0(t')|\psi_{in}\rangle < \infty$$

となり、左辺はどこかに収束します。それを $|\psi\rangle$ とすれば

$$|\psi\rangle = \lim_{t\to-\infty} U^\dagger(t)U_0(t)|\psi_{in}\rangle = \Omega_+|\psi_{in}\rangle$$

$|\psi_{out}\rangle$ でも同様です。