量子力学Tips

～量子力学におけるグリーン関数～（１）

KENZOU

2008 年 6 月 8 日

♣ いよいよ本格的な梅雨の季節に入り，雨がしとしとと降っている朝、周りの雨で輝いた新緑を眺めながらユナが少し大きめのカラフルな傘を差しながらＫ氏を訪ねてきた。

- ユナ：こんにちわ K さん。おはようございます。
- K氏：やぁ～，ユナ。久しぶりだね。それにしてもこんな雨の日の早朝からわざわざ尋ねてくるなんて一体何事だい。
- ユナ：あら，ご迷惑だったかしら。いやちょっとＫさんにお伺いしたいことがあって，時間をしっかりとろうと思って押しかけてきたわけなのよ。
- K氏：そうかい，迷惑なんてちっともないよ。それでその伺いたいことって何なんだい。
- ユナ：実は量子力学におけるグリーン関数についてなの。以前，グリーン関数に関するお話をエミリーにされたことがあるわね。今度は量子力学ではグリーン関数がどのように活躍しているのか，まぁまだ先になるけど場の量子論にいけばグリーン関数が一杯でてくると言われるし，今のうちに親しんでおきたいと思っているの。
- K氏：そうなんだ。わかったよ。それじゃ丁度いいテキスト（小泉義晴「量子物理学とグリーン関数」現代工学社）があるので，それをネタ本として話を進めようか。
- ユナ：よろしくお願いします。

1　グリーン関数の定義

グリーン関数とは，数学的には次のように定義される。L を線形微分演算子とし，関数 $\phi(x)$ に対する線形微分方程式

$$L\phi(x) = \rho(x) \tag{1}$$

があるとき，

$$LG(x, x') = \delta(x - x') \tag{2}$$

を満たす $G(x, x')$ を L のグリーン関数という。そしてグリーン関数を使えば (1) の解は

$$\phi(x) = \int dx' G(x, x')\rho(x') \tag{3}$$

と表される。グリーン関数 $G(x, x')$ は，形式的には

$$G(x, x') = L^{-1}\delta(x - x') \tag{4}$$

と表すことができるように，**グリーン関数はL の逆演算子**という関係にある。

量子力学では，演算子は状態ベクトル（ケット）に作用するものとして扱われるので，まず状態ベクトルに作用する演算子として**グリーン演算子**を定義し，それから**グリーン関数**を定義する。ある任意の系における線形演算子を L とし，次の方程式を考える。

$$L|a\rangle = |b\rangle \tag{5}$$

ここで L の逆演算子 L^{-1} をグリーン演算子 G として定義すると

$$|a\rangle = L^{-1}|b\rangle = G|b\rangle$$

任意の基底ベクトル $\langle\alpha|$ を (6) の左からかけると

$$\langle\alpha|\, a\rangle = \langle\alpha\,|G\,|b\rangle \tag{6}$$

が得られる。(6) は連続基底 $|\beta\rangle$ の完全性[1]を使うことで

$$\langle\alpha\,|G\,|b\rangle \;= \int d\beta\,\langle\alpha\,|G\,|\beta\rangle\,\langle\beta|\,b\rangle = \int d\beta\,G(\alpha,\beta)\psi_b(\beta) \tag{7}$$

となる。(6) を波動関数で表すと

$$\psi_a(\alpha) = \int G(\alpha,\beta)\psi_b(\beta) \tag{8}$$

と書ける。この $G(\alpha,\beta)$ を**グリーン関数**と定義する。

2　固有値問題のグリーン関数

2.1　グリーン関数が満たす微分方程式

時間独立な１粒子の運動を表す全ハミルトニアン H を次のように定義する。

$$H = H_0 + H_I \tag{9}$$

ここで H_0 は粒子の運動エネルギーを表す自由ハミルトニアン $(H_0 = -(\hbar^2/2m)\nabla^2)$ で，H_I は相互作用ハミルトニアンとする。この系のシュレーディンガー方程式は

$$H\psi(r) = E\psi(r) \tag{10}$$

である。(10) を書きなおすと

$$(E-H)\psi(r) = L\psi(r) \tag{11}$$

となる。(11) で E は実数，H はエルミート線形演算子だから $E-H$ もエルミート線形演算子となり，**この逆演算子をグリーン演算子**G とすると，G は

$$G = L^{-1} = (E-H)^{-1} \tag{12}$$

と表すことができる。ただし，$(E-H)^{-1}$ は E が H の固有値と一致するときは不定になる。この回避の仕方は後ほどでてくるので，ここではこの問題は棚上げしておく。(12) より，

$$LG = (E-H)G = \mathbf{I} \tag{13}$$

(13) の両辺を状態基底 $|r\rangle$ で挟むと

$$\langle r\,|(E-H)G\,|r'\rangle \;= \langle r\,|\mathbf{I}\,|r'\rangle \;= \delta(r-r') \tag{14}$$

また，(14) の左辺は

$$\begin{aligned}
\langle r\,|(E-H)G\,|r'\rangle \;&= \int dr''\,\langle r\,|E-H\,|r''\rangle\langle r''|\,G|\,r'\rangle = \int dr''\,\langle r\,|E-H\,|r''\rangle\;G(r'',r') \\
&= \int dr''\,\langle r\,|L\,|r''\rangle\;G(r'',r') = \int dr''\,\langle Lr|\,r''\rangle G(r'',r') = \int dr''\delta(r-r'')LG(r'',r') \\
&= LG(r,r') = (E-H)G(r,r') \quad \left(f(r) = \int dr' f(r')\delta(r-r')\ \text{を使う}\right) \\
&= \left(E + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - H_I(r)\right)G(r,r')
\end{aligned} \tag{15}$$

[1] $\int\langle\beta|\,\beta\rangle d\beta = \mathbf{I}$

となる。(13)(15) より，**グリーン関数の満たすべき方程式**は

$$\left(E+\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2-H_I(r)\right)G(r,r')=\delta(r-r') \tag{16}$$

となる。

2.2 グリーン演算子のスペクトル表示

系が飛び飛びの離散状態をとる場合のグリーン関数について調べていこう。その前に線形演算子のスペクトル表示について復習しておく。

2.2.1 線形演算子のスペクトル表示

線形演算子のスペクトル表示とは，線形演算子をその固有状態と固有値で展開した表示のことを言う。エルミート演算子を L とし，その固有値を E_i，固有ベクトルを $|i\rangle$ とすると

$$L\,|i\rangle=E\,|i\rangle \tag{17}$$

(17) の両辺に左から $\langle j|$ をかけると

$$\langle j\,|L|\,i\rangle=\langle j\,|E_i|\,i\rangle=E_i\,\langle j|\,i\rangle=E_i\delta_{ij} \tag{18}$$

恒等演算子 $\mathbf{I}$ を使う[2]と

$$\begin{aligned}L=L\cdot\mathbf{I}&=\sum_{i=all}L\,|i\rangle\langle i|=\sum_i\sum_{j=all}|j\rangle\langle j\,|L|\,i\rangle\langle i|\\&=\sum_i\sum_j|j\rangle\,E_i\delta_{ij}\,\langle i|=\sum_i|i\rangle E_i\langle i|\end{aligned} \tag{19}$$

が得られる。(19) を**演算子L のスペクトル表示**という。L の逆演算子を G とすると，G を (17) の両辺に作用させると

$$GL\,|i\rangle=GE_i\,|i\rangle \tag{20}$$

$GL=\mathbf{I}$ であるので (20) は

$$\mathbf{I}\,|i\rangle=1\,|i\rangle=GE_i\,|i\rangle$$

これから

$$G=\frac{1}{E_i}\,|i\rangle \tag{21}$$

を得る。これは演算子 L の逆演算子 G の固有値は，L の固有値の逆数であり，その固有値の固有ベクトルは G の固有ベクトルでもあるということを意味している。ただし，E_i がゼロを含む場合は L^{-1} は存在しないことに注意が必要。(21) の両辺に右から $\langle i|$ をかけてその和をとると

$$\sum_i G\,|i\rangle\langle i|=\sum_i\frac{1}{E_i}\,|i\rangle\langle i| \tag{22}$$

(19) と同様にして

$$\begin{aligned}G=G\cdot\mathbf{I}&=\sum_i G\,|i\rangle\langle i|=\sum_i\sum_j|j\rangle\langle j\,|G|\,i\rangle\,\langle i|\\&=\sum_i\sum_j|j\rangle\left\langle j\left|\frac{1}{E_i}\right|i\right\rangle\langle i|=\sum_i\sum_j|j\rangle\,\frac{1}{E_i}\delta_{ij}\,\langle i|\\&=\sum_i|i\rangle\,\frac{1}{E_i}\,\langle i|\end{aligned} \tag{23}$$

を得る。これを**逆演算子G のスペクトル表示**という。

[2] $\sum_{i=all}|i\rangle\,\langle i|=1$：$|i\rangle$ の完全性条件と呼ばれる。

2.3 グリーン演算子のスペクトル表示

系の全ハミルトニアン H の固有状態が離散的状態 $|n\rangle$ にあるとすると，各状態に対応する固有値 E_n も離散的値ををとる。(23) を使うと

$$G = L^{-1} = (E-H)^{-1} = \sum_n (E-H)^{-1}\,|n\rangle\langle n| \\ = \sum_n \frac{|n\rangle\langle n|}{E-E_n} \tag{24}$$

と表せる。これを**グリーン演算子のスペクトル表示**という。グリーン関数はグリーン演算子 G を状態 $\langle l|$，$|l'\rangle$ で挟んで

$$G(l,l') = \langle l\,|G\,|l'\rangle\ = \sum_n \frac{\langle l|\,n\rangle\langle n|l'\rangle}{E-E_n} \tag{25}$$

で与えられる。ここで 1 次元の自由粒子のグリーン関数を求めてみよう。境界条件として $x=0$ のとき $\psi_n(0)=0$, $x=a$ のとき $\psi_n(a)=0$ とする。シュレーディンガーの方程式は

$$\frac{d^2\psi_n(x)}{dt^2} + k_n^2\psi_n(x) = 0, \quad k_n = \sqrt{\frac{2mE_n}{\hbar}^2}$$

境界条件を満たす固有関数は

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}sin(k_n\cdot x) = \sqrt{\frac{2}{a}}sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

固有値は

$$E_n = \frac{n^2}{2m}\left(\frac{\hbar\pi}{a}\right)$$

であるから，求めるグリーン関数は (25) より

$$G(x,x') = \langle x\,|G\,|x'\rangle\ = \frac{\psi_n(x)\psi_n(x')}{E-E_n} = \sum_n \frac{\left(\frac{2}{a}\right)sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)sin\left(\frac{n\pi}{a}x'\right)}{E-\frac{n^2}{2m}\left(\frac{\hbar\pi}{a}\right)^2} \tag{26}$$

となる。

2.4 周期的境界条件のグリーン関数

系が長さ周期的 a の周期的な境界条件をもつ場合のグリーン関数をスペクトル表示を使って表してみよう。境界条件は

$$\psi_n(x) = \psi_n(x+a) \quad \cdots(\text{周期 } a \text{ で固有関数は等しい}) \\ \frac{d\psi_s(x)}{dx} = \frac{d\psi_s(x+a)}{dx} \quad \cdots(\text{周期的境界での連続性}) \tag{27}$$

である。ハミルトニアン H は

$$H = \frac{1}{2m}p^2 \tag{28}$$

であるので，p-表示の固有関数 $\psi(p) = \langle p|\,x\rangle$ を使うと便利である。そうすると

$$H\psi(p) = \frac{p_n^2}{2m}\psi(p) = E_n\psi(p) \tag{29}$$

これから $p_n = \sqrt{2mE_n}$ が得られる。また $p=\hbar k$ であるので，$k_n = p_n/\hbar = \sqrt{2mE_n}/\hbar$ である。固有関数 $\psi(x)$ は

$$\psi_n(x) = \langle x|\,p\rangle_n = ce^{ip_n\,x/\hbar} = ce^{ik_nx} \tag{30}$$

となる[3]。c は規格化定数で，区間 $-a/2 \le x \le a/2$ で規格化すると

$$\int_{-a/2}^{a/2} dx|\psi(x)|^2 = c^2a = 1 \longrightarrow c = \sqrt{\frac{1}{a}}$$

[3]「量子力学 Tips～座標表示と運動量表示～」を参照。

となるので，規格化された固有関数は

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{a}} e^{ik_n\,x} \tag{31}$$

となる。これに境界条件 (27) を課すと

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{a}} e^{ik_n\,x}, \quad \psi_n(x+a) = \sqrt{\frac{1}{a}} e^{ik_n\,(x+a)} = e^{ik_n a}\psi_n(x) \tag{32}$$

$$\frac{d\psi_n(x)}{dx} = ik_n \sqrt{\frac{1}{a}} e^{ik_n\,x}, \quad \frac{d\psi_n(x+a)}{dx} = ik_n e^{ik_n\,a} \sqrt{\frac{1}{a}} e^{ik_n\,x} \tag{33}$$

これから境界条件を満たすには

$$k_n\pi = 2n\pi, \quad (n = \pm 1, \pm 2, \cdots)$$

であればよい[4]。したがって

$$E_n = \frac{{p_n}^2}{2m} = \frac{\hbar k_n^2}{} 2m^2 = \frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2} n^2 \tag{34}$$

求めるグリーン関数のスペルトル表示は，したがって

$$G(x,x') = \sum_n \frac{\psi_n(x)\psi_n^*(x')}{E-E_n} = \sum_n \frac{1}{a} \frac{e^{i\frac{2\pi n}{a}(x-x')}}{E - \left(\frac{2\pi^2\hbar^2}{ma}\right) n^2} \tag{35}$$

と得られる。

3　摂動論におけるグリーン関数

定常状態でのシュレーディンガー方程式

$$H\psi(r) = (H_0 + H_I)\psi(r) = E\psi(r) \tag{36}$$

より，線形演算子を $L = H - E$ とすると

$$(H-E)\psi(r) = L\psi(r) \tag{37}$$

L の逆演算子をこの系のグリーン演算子 G とすると

$$G = L^{-1} = (E-H)^{-1} \tag{38}$$

$$(E-H_0)\psi(r) = H_I\psi(r) \tag{39}$$

次ぎに，非摂動項の線形演算子を $L_0 = E - H_0$ とし，それに対応するグリーン演算子を G_0 とすると

$$G_0 = L_0^{-1} = (E-H_0)^{-1} \tag{40}$$

G_0 は非摂動グリーン演算子と呼ばれる。いま，逆演算子が定義される互いに非可換な演算子 A，B の間には

$$\frac{1}{A} - \frac{1}{B} = \frac{1}{A}(B-A)\frac{1}{B} = \frac{1}{B}(B-A)\frac{1}{A}$$

が成立する。これから

$$\frac{1}{A} = \frac{1}{B} + \frac{1}{B}(B-A)\frac{1}{A} \tag{41}$$

で，$A = G = E - H$，$B = G_0E - H_0$ とおくと

$$(E-H)^{-1} = (E-H_0)^{-1} + (E-H_0)^{-1}H_I(E-H)^{-1}$$

となって，グリーン関数は

$$G = G_0 + G_0 H_I G \tag{42}$$

[4] $n = 0$ の場合は $E_n = 0$ となる。

という方程式を満たすことがわかる。これを逐次展開で解くと

$$G = G_0 + G_0 H_I + G_0 H_I G_0 H_I G + \cdots \tag{43}$$

のようになる。(39) で波動関数を $\psi(x) \equiv |n\rangle$ と書いて

$$(E - H_0)|n\rangle = H_I |n\rangle \tag{44}$$

これから

$$|n\rangle = \frac{H_I}{E - H_0}|n\rangle = G_0 H_I |n\rangle \tag{45}$$

これは (44) からわかるように，摂動下の状態 $|n\rangle$ は，摂動ハミルトニアン H_I と非摂動グリーン演算子 G_0 で記述できることを示している。そこでこの式の両辺に $\langle x|$ をかけ，$\langle x|n\rangle$ に添字 I をつけると，H_I は単に座標の関数であるから

$$\begin{aligned}
\langle x|n\rangle_I &= \int dx'' \int dx' \, \langle x|G_0|x''\rangle \langle x''|H_I|x'\rangle \langle x'|n\rangle \\
&= \int dx'' \int dx' G_0(x, x'') H_I \delta(x' - x'') \langle x'|n\rangle \\
&= \int dx' G_0(x, x') H_I(x') \langle x'|_n\rangle \\
&= \int dx' G_0(x, x') H_I(x') \psi_n(x')
\end{aligned} \tag{46}$$

となる。一方，非摂動系では状態関数を $|n\rangle_0$ として

$$H_0 |n\rangle_0 = E |n\rangle_0 \tag{47}$$

両辺に左から $\langle x|$ をかけると

$$\langle x|H_0|n\rangle_0 = \langle x|E|n\rangle_0 = E\langle x|n\rangle_0 = E\psi_{0n}(x) \tag{48}$$

$\psi_0(x)$ は非摂動状態での解であるから，系全般にわたって満足するシュレーディンガー方程式 (36) の解は

$$\psi_n(x) = \psi_{0n}(x) + \int dx' G_0(x, x') H_I(x') \psi_n(x') \tag{49}$$

となる。ところで (49) は右辺に $\psi_n(x)$ があるので，正確には解が求まったことにならない（形式解）。そこで逐次近似（摂動展開）で解を求めていくことになる (面倒なので下添字 n は省略する)。

$$\psi(x) = \psi_0(x) + \int dx' G_0(x, x') H_I(x') \left[\psi_0(x') + \int dx'' G_0(x', x'') H_I(x'') \psi(x'')\right] \tag{50}$$

$$= \psi_0(x) + \int dx' G_0(x, x') H_I(x') \psi_0(x') + \int dx'' \int dx' G_0(x, x') H_I(x') G_0(x', x'') H_I(x'') \psi(x'') \tag{51}$$

$$= \psi_0(x) + \int dx' G_0(x, x') H_I(x') \psi_0(x') \tag{52}$$

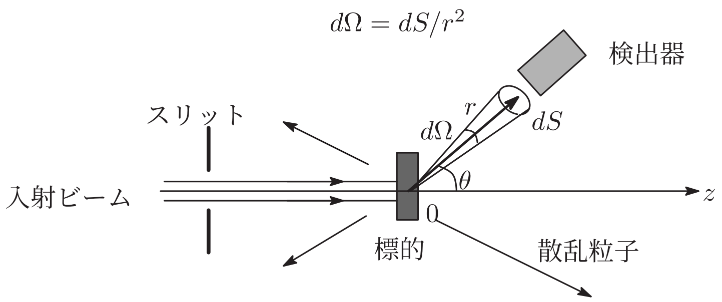
$$+ \int dx'' \int dx' G_0(x, x') H_I(x') G_0(x', x'') H_I(x'') \psi_0(x'') + \cdots \tag{53}$$

4 散乱問題とグリーン関数

4.1 散乱角と散乱断面積

いま，z 方向に単位面積を通して毎秒入射してくる粒子の個数を N 個とし，標的によって散乱され毎秒 dS を通して検出器に到達する粒子の数を ΔN とすると，立体角を $d\Omega$ として

$$\Delta N = \sigma(\theta) N d\Omega \tag{54}$$



比例定数 $\sigma(\theta)$ **微分断面積**といい，角 θ を**散乱角**という。微分断面積は面積の次元を持っているのでそのように呼ばれるが，これは毎秒単位面積を通って 1 個の粒子が入射したとき，散乱角 θ の方向の単位立体角内に散乱されてくる粒子の数の割合を表す。微分断面積を全立体角にわたって積分したものは全断面積と呼ばれる。

$$\sigma^{total} = \int \sigma(\theta) d\Omega \tag{55}$$

これは毎秒単位面積を通って 1 個の粒子が入射するとき，衝突を起こして散乱される全粒子数の割合を表す。

4.2　定常的な散乱問題におけるグリーン関数

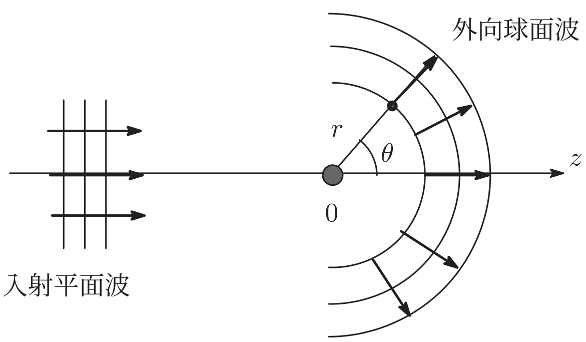
定常的なシュレーディンガー方程式

$$H\psi(x) = (H_0 + H_I)\psi(x) = E\psi(x) \tag{56}$$

を考え，これを散乱現象に適応した境界条件のもとに解いていくことを考える。つまり，標的（ポテンシャル）に向けて遠方から入射してくる平面波 $e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}$ は，ポテンシャルで散乱されて外向きに広がっていく球面波 $e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}/r}$ を生みだす。したがって，ポテンシャルの中心 O から十分に遠く離れたところでは，z 軸の正の向きに進行する平面波と原点 O を中心とする外向きの球面波とから成り立っており，散乱の波動関数は無限遠方（漸近解）では

$$\psi_k(r) \xrightarrow{t\to\infty} (2\pi)^{-3/2}\left[e^{ikz} + \frac{f(\theta)}{r}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\right] \tag{57}$$

で表される。これが散乱問題の境界条件となる。ここで，$f(\theta)$ は散乱波の振幅で散乱振幅と呼ばれており，一般に散乱角 θ の関数となる。前にかかっている $(2\pi)^{-3/2}$ は，$(2\pi)^3\ \mathrm{cm}^3$ の立方体内に 1 個の粒子が存在するように規格化した入射平面波の規格化因子である。



さて，(24) のグリーン演算子は離散的な状態における表記であった。これを連続的な固有状態 $|k\rangle$ における表記に書き直してみよう。自由粒子のエネルギーは $E = (\hbar^2/2m)k^2$ であるから，この場合のグリーン演算子は

$$G = \frac{2m}{\hbar^2}\int dk' \frac{|k'\rangle\langle k'|}{k^2 - k'^2} \tag{58}$$

となる。(58) の両辺に左右から $\langle r|, |r'\rangle$ を挟むと

$$\langle r|G|r'\rangle = \frac{2m}{\hbar^2}\int dk' \frac{\langle r|k'\rangle\langle k'|r'\rangle}{k^2 - k'^2} \tag{59}$$

3 次元規格化波動関数 $\langle r|\,k\rangle$ は

$$\langle r|\,k\rangle = (2\pi)^{-3/2} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{60}$$

であるので，これを (59) に入れると

$$\langle r\,|G\,|r'\rangle\ = \frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{(2\pi)^3}\int dk'\frac{e^{i(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\cdot\boldsymbol{k}'}}{k^2-k'^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{(2\pi)^3}\int dk'\frac{e^{i(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\cdot\boldsymbol{k}'}}{k^2-k'^2+i\epsilon} \tag{61}$$

(61) の最後で分母に $i\epsilon$ を加えたのは，舞台裏を明かしておくと $k=k'$ の極を避け外向き球面波に対応させるためである[5]。(←この点は後ほど補足説明をするので，いまは気にしない。)。
(61) の積分を実行すると

$$\left\langle r\left|G^{(+)}\right|r'\right\rangle = -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} = \frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} \tag{62}$$

となる。ここで外向き球面波に対応して $G\equiv G^{(+)}$ と表記した。
定常的なシュレーディンガー方程式 (56) の解は (49) で与えられた。

$$\psi_n(x) = \psi_{0n}(x) + \int dx' G_0(x,x')H_I(x')\psi_n(x') \tag{63}$$

いま注目している系に対応してこの方程式を書き直すと

$$\psi^{(+)}(r) = \psi_0(r) + \int dx' G_0^+(r,r')H_I(r')\psi^+(r') \tag{64}$$

となる。これは求める解が右辺にふくまれているので形式解である。そこで (64) を逐次展開すると

$$\begin{aligned}\psi^{(+)}(r) = \psi_0(r) &+ \int dr' G_0^+(r,r')H_I(r')\psi_0(r') \\ &+ \int dr''\int dr' G_0^+(r,r')H_I(r')G_0^+(r',r'')H_I(r'')\psi_0(r'') + \cdots\end{aligned} \tag{65}$$

が得られる[6]。

4.2.1 ボルン近似

$\psi_0(r) = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ として，(65) の摂動展開の第 2 項までとった近似を**第１ボルン近似**という。この近似の意味は，散乱ポテンシャルがゼロでない領域で小さいと仮定し，入射平面波を (64) の右辺の $\psi^+(r')$ の代用とするということである。

$$\psi^{(+)}(r) = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int dr'\frac{e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}H_I(r')e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'} \tag{66}$$

が得られる。

$$\begin{aligned}|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'| &= (r^2+r'2-2rr'cos\theta)^{1/2} \approx r\left(1-2\frac{r'}{r}cos\theta\right)^{1/2} \approx r - r'cos\theta \quad (r\gg r') \\ \frac{1}{|\boldsymbol{e}-\boldsymbol{r}'|} &= \frac{1}{r}\sum_{\ell=0}^{\infty}\left(\frac{r'}{r}\right)^{\ell}P_\ell(cos\theta) \approx \frac{1}{r}+\frac{r'}{r^2}cos\theta \approx \frac{1}{r}\end{aligned} \tag{67}$$

となるので，(67) を (66) に入れると

$$\begin{aligned}\psi^{(+)}(r) &= e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}}{r}\int dr' H_I(r')e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'cos\theta)} \\ &= e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}}{r}\int dr' H_I(r')e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}'} \quad (\boldsymbol{k}'=\boldsymbol{k}cos\theta) \\ &= e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + \frac{e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}}{r}f(\theta)\end{aligned} \tag{68}$$

[5]「対話・グリーン関数 (1)」を参照してください。
[6] この級数が収束するための条件はポテンシャルのある領域の半径を a，ポテンシャルの大きさを $\tilde{H}_I$ とすると $\left|\frac{m}{\hbar^2}\tilde{H}_I a^2\right| \ll 1$

運動量遷移を

$$\boldsymbol{K} = \boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}' \tag{69}$$

とおくと[7]

$$K^2 = k^2 + k'^2 - 2kk'cos\theta = 2k^2(1 - cos\theta) = 4k^2 sin^2\frac{\theta}{2}, \quad (k = k') \tag{70}$$

これを使うと

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int dr' H_I(r')e^{i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}'} \tag{71}$$

いま $H_I(r')$ が球対称ポテンシャルであるとすると $\boldsymbol{K}$ の方向を z 軸にとり，$\boldsymbol{r}' = (r', \theta', \phi')$ に関して角度積分をおこなうと

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta' e^{iKr'cos\theta'} sin\theta' = 2\pi\left[-\frac{1}{Kr'}e^{iKr'cos\theta}\right]_0^{\pi} = \frac{4\pi sinKr'}{Kr'} \tag{72}$$

したがって動径方向の積分を実行して

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2 K}\int dr' H_I(r')sin(Kr')r' \tag{73}$$

を得る。これがボルン近似における散乱振幅である。

4.2.2　湯川ポテンシャル

湯川ポテンシャルによるボルン振幅を求めてみよう。湯川ポテンシャルは

$$V(\boldsymbol{r}) = -V_0\frac{e^{-\mu r}}{r} \tag{74}$$

で与えられるので (73) より

$$\begin{aligned}
f(\theta) &= \frac{2mV_0}{\hbar^2 K}\int_0^{\infty} dr\, sin(Kr)e^{-\mu r} = \frac{2mV_0}{\hbar^2 K}\frac{1}{2i}\int_0^{\infty} dr\left\{e^{iKr} - e^{-iKr}\right\}e^{-\mu r} \\
&= \frac{mV_0}{i\hbar^2 K}\int_0^{\infty} dr\left\{e^{-(\mu - iK)r} - e^{-(\mu + iK)r}\right\} = \frac{mV_0}{i\hbar^2 K}\left[\frac{1}{\mu - iK} - \frac{1}{\mu + iK}\right] \\
&= \frac{2mV_0}{\hbar^2}\frac{1}{\mu^2 + K^2} = \frac{2mV_0}{\hbar^2}\frac{1}{4k^2 sin^2\frac{\theta}{2} + \mu^2}
\end{aligned} \tag{75}$$

♣ *Q&A* ———

- K氏：とりあえず以上だけど，何か質問ある。
- ユナ：ありがとう，お疲れさまでした。いままでのお話は定常状態のシュレーディンガー方程式についてのグリーン関数についてなのね。
- K氏：そうなんだ。 時間に依存するシュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = H\psi(x,t) \tag{76}$$

  の場合のグリーン関数はまた次の機会に話しようと思って。
- ユナ：今日はいままでの話で十分よ。時間に依存するグリーン関数のお話は次の機会の楽しみとしておくわ。ところで，散乱問題でグリーン関数を使った Lippmann-Schwinger の理論というのを聞いたことがあるのだけど，最後にその話を少ししていただけるかしら。

[7] 散乱前後で波数ベクトルの方向は変化するが，波数の大きさは変わらない。

- K：Lippmann-Schwinger の散乱理論は実際の計算に役立つことは少ないけど，形式的に一般論を展開するときには非常に重要な役割を演じるものだね。演算子はかりやすいように太字で書くことにすると，シュレーディンガー方程式は

$$(\boldsymbol{H}_0 + \boldsymbol{V})\psi(x) = E\psi(x) \tag{77}$$

セクション 3 の「摂動論におけるグリーン関数」の議論より

$$\psi_n^{\pm}(x) = \frac{\boldsymbol{V}}{E_n - \boldsymbol{H}_0 \pm \imath\epsilon}\psi_n^{\pm}(x) = \boldsymbol{G}_0^{\pm}\,\boldsymbol{V}\psi_n^{\pm}(x) \tag{78}$$

が得られるね。非摂動系の状態関数を ϕ とすると

$$\psi_n^{(\pm)}(x) = \phi_n(x) + \frac{\boldsymbol{V}}{E_n - \boldsymbol{H}_0 \pm \imath\epsilon}\psi_n^{\pm}(x) = \phi(x) + \boldsymbol{G}_0^{\pm}\,\boldsymbol{V}\psi_n^{\pm}(x) \tag{79}$$

は (77) を満たす解となっている。これを **Lippmann-Schwinger の方程式**と呼んでいる。この方程式は (49) の積分方程式よりも見通しがいいよね。形式論は理論的取り扱いに力を発揮するというわけ。ユナ：なるほど，理論では形式論というのは大変大事なものなのね。今日はありがとうございました。グリーン関数のお話で散乱問題までお話を聞くことができて実り多かったわ。ところで全然関係ない話だけど，オリビアニュートンジョンの母方の祖父はボルン近似にでてきた MaxBorn ですってね。

- K氏：エ～っ，そうなの。知らなかった。映画「ザナドウ」や「フィジカル」なんか懐かしいね。

- ユナ：まっ，そういうことで，今日はこれで失礼します。またの機会を楽しみにしているわ。

- K氏：それじゃ気をつけてね～。