

概要

原子核の電荷分布や電子-原子核弾性散乱を理論的に扱う方法について解説する。まず原子核の電荷分布の解析においては、原子核の相対論的模型を用いて原子核の密度分布や電荷分布を求める。この模型では、原子核を記述するための粒子として、核子のほかに中間子や光子を導入する。そして、これらの粒子の多体系としての原子核を、相対論の要請を満足するラグランジアンを基礎にして取り扱う。ただし、実際の計算では、オイラー・ラグランジュ方程式から導かれる場の方程式を直接解くことは難しいので、計算可能な形になるようにいくつかの近似を行う。この近似によって原子核の基底状態における電荷分布を計算できるようになる。次に、このようにして求めた原子核の電荷分布を用いて電子-原子核弾性散乱を解析する方法について述べる。電子散乱は原子核の電荷分布を調べるための方法であるが、散乱の前後で電子のエネルギーが変化しない弾性散乱を考えることで、理論的にも実験的にも問題の取り扱いが容易となる。実際の散乱実験で測定される物理量は散乱の微分断面積であるため、実験データと比較できるように、理論的に求めた原子核の電荷分布を用いて微分断面積を計算する。微分断面積を計算するための方法にはいろいろなものがあるが、ここでは部分波の方法を採用する。これは電子の波動関数を計算しやすい部分波に分けて考える方法で、微分断面積をかなり正確に計算できる。最後に実験データと計算結果の比較を行い、原子核の電荷分布や電子散乱の微分断面積について考察する。

目次

1	はじめに	1
2	原子核の相対論的模型	3
2.1	ラグランジアンと場の方程式	3
2.2	平均場近似	5
2.3	中心力場におけるディラック・ハートリー方程式	7
2.4	ディラック・ハートリー方程式の計算方法	10
3	原子核の電荷分布	18
3.1	核子の形状因子	18
3.2	電荷分布の計算方法	24
4	電子散乱	29
4.1	クーロン散乱の部分波	30
4.2	部分波の漸近形	35
4.3	電子散乱の微分断面積	39
4.4	部分波展開	42
4.5	微分断面積の計算方法	47
5	計算結果と考察	50
5.1	微分断面積の計算結果	50
5.2	中性子数と原子核の形状	55
6	まとめと今後の課題	62
A	付録	63
A.1	ディラック方程式の変形	63
A.2	電子散乱の入射波	66
A.3	ガンマ関数の計算方法	68

1 はじめに

電子散乱はミクロな物の性質を調べるための方法である。ミクロな物を電子散乱によって調べたい場合、それを標的にして電子を飛ばし、標的との相互作用によって散らばった電子を見ることで標的に関する情報を得る。入射電子の運動エネルギーが、その静止質量の数百倍となる高エネルギーの電子散乱では、電子のド・ブロイ波長が標的内の原子核の大きさよりも小さくなり、電子に対して原子核は広がりをもった粒子としてふるまうようになる。さらに、このようなエネルギー領域では、原子核のまわりの軌道電子による入射電子の散乱がなくなるので、散乱現象を調べる上で原子核と散乱電子の相互作用だけが本質的である。原子核と電子の相互作用は、そのほとんどすべてが陽子と電子の電氣的な相互作用であるから、電子-原子核散乱は原子核の電磁氣的な性質だけで決まる現象である。そのため、核力の複雑な性質を考えずに原子核の構造を調べられる電子-原子核散乱は非常に扱いやすく、原子核の電荷分布に関する精度のよい情報を与えてくれる。

本論分では、原子核の電荷分布を理論的に求める方法と、その電荷分布を用いた電子-原子核散乱の理論的な解析法について説明する。まず第2節では、原子核の相対論的模型を用いて原子核の密度分布を求める。現象論的に考え出されたこの模型では、理論に含まれるフリーパラメーターをうまくとることで、周期表にあるほとんどすべての原子核について、その性質をうまく予言することができる。とくに、電荷分布のような原子核全体の平均的な性質については、非相対論のもっとも洗練されたモデルに匹敵するくらいよく再現できる。ただし、この模型を使って求めた陽子の密度分布は、そのままでは原子核の電荷分布に一致しない。そこで第3節では、求めた核子の密度分布を使って原子核の電荷分布を計算する。核子密度と電荷密度のちがいは核子の形を考えることによって理解でき、核子の形状因子を導入することで電荷密度を計算できるようになる。そのあとの第4節では、原子核の電荷分布が与えられたときに、電子-原子核散乱の微分断面積を計算する方法について述べる。散乱の微分断面積とは、散乱方向とその方向に散乱する粒子の数を対応させたものである。微分断面積を求める方法の中でもっとも有名なものはボルン近似で、非相対論的な量子力学では、入射粒子の運動エネルギーが大きくなるほどボルン近似はよい近似になった。そのため、電子の運動エネルギーが非常に大きい電子-原子核散乱においてもボルン近似が有効であるように思える。しかし、相対論的な扱いが必要となる散乱を考える場合には、高エネルギーの散乱であってもボルン近似がよい近似になるとは限らない。そこで、本論分では散乱問題を近似なしに解く部分波展開を使って微分断面積を求める。散乱問題では、与えられる境界条件が特殊なため微分方程式を直接解くことは難しいが、部分波展開による方法では、境界条件を満足する解を完全系で展開することによって散乱問題を解く。この展開に用いる基底の1つ1つを部分波といい、それぞれは角運動量の固有状態である。したがって、部分波展開は中心力の場合にしか使えないが、中心力の場合にはかなり正確に微分断面積を求められる。第5節では、原子核の電荷分布や電子散乱の微分断面積の計算結果を実験データと比較してみる。また、原子核の中性子数を変えたときに原子核の電荷分布がどのように変化するか調べる。最後の第6節では、まとめと今後の課題について述べる。

本論分には相対論的な記述を必要とする箇所がある。相対論的な四元ベクトルの成分を表す場合、添え字には μ, ν のようなギリシア文字を使う。そして、同じギリシア文字の添え字が上付きと下付きで対になってあらわれたときには、和の記号を書かなくてもその添え字について0から3まで和をとる。ただし、計量テンソルは

$$g^{\mu\nu} = \begin{cases} 1 & (\mu = \nu = 0) \\ -1 & (\mu = \nu = 1, 2, 3) \\ 0 & (\mu \neq \nu) \end{cases} \quad (1.1)$$

である。また、ある四元ベクトル A を表す場合に、代表的に 1 つの成分だけを書いて A^μ と表すことがある。一方、3 つの成分をもつ量（空間ベクトル、スピンのベクトル、アイソスピンベクトルなど）をまとめて表す場合には \mathbf{A} のような太字を使う。共変的な記述に必要な γ 行列には次を使う。

$$\gamma^0 = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\gamma} = \begin{bmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ -\boldsymbol{\sigma} & 0 \end{bmatrix} \quad (1.2)$$

ただし、 I は 2×2 の単位行列、 $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ はパウリ行列

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (1.3)$$

である。

原子核の電荷分布を求めたり、電子散乱の解析を行ったりするのに電磁気的な量が必要になるが、電磁気的な量を扱う場合はヘヴィサイド・ローレンツ単位系と同じ形式で式を記述する。

2 原子核の相対論的模型

原子核の電荷分布を求める。素朴に考えると、原子核の電荷分布は陽子の分布によって決まっているように思える。しかし、核子のような構造をもった粒子を扱う場合、その密度分布と電荷分布は同じにならない。そのため、原子核の電荷分布を正しく求めるためには、理論にも核子の構造をきちんと取り入れなければならない。しかし、そのような計算は複雑なものになることが予想されるし、核子を電子のような点粒子として扱っても悪い近似ではないだろうから、まずは核子を構造のない点粒子として扱うことにする。点粒子に対しては密度分布と電荷分布が比例するので、陽子の密度分布を求めれば原子核の電荷分布も求められる。このようにして求めた原子核の電荷分布は、実際の原子核の電荷分布をうまく再現するものではないが、求めた核子の密度分布を使って、あとから現実的な原子核の電荷分布を計算する方法があるので、核子を電子のように扱うことを気にする必要はない。

2.1 ラグランジアンと場の方程式

相対論的な原子核の模型を使って核子密度を求める。場の理論を使ったこのモデルでは、ラグランジアンを基礎にして原子核を記述し、核子の場をディラック場によって表す。また、核子間の相互作用は中間子場と電磁場を使って記述する。そのため原子核の構成要素は核子と中間子・光子である。核子間に働く核力を媒介する中間子場には、性質の異なるいくつかの場が使われる。表 1 は、それらの中間子場を表す記号と性質を示したものである。このうち σ 中間子は現実には存在しないが、これは 2 つの π 中間子交換によって生じる核子間の引力を表す実効的な粒子である。また ω 中間子や ρ 中間子についても、現実の ω 中間子や ρ 中間子だけを表しているわけではない。これらの場が満足する方程式は、ローレンツ変換に対して不変なラグランジアン密度からオイラー・ラグランジュ方程式によって導かれる。ラグランジアン密度 \mathcal{L} は次で与えられる。

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \bar{\psi} \left[\gamma^\mu \left(i\hbar \partial_\mu - g_\omega \omega_\mu - g_\rho \boldsymbol{\rho}_\mu \cdot \boldsymbol{\tau} - eA_\mu \frac{1 + \tau_z}{2} \right) - (Mc^2 - g_\sigma \sigma) \right] \psi \\ & + \left[\frac{1}{2} (\partial^\mu \sigma)(\partial_\mu \sigma) - \frac{1}{2} \left(\frac{m_\sigma c}{\hbar} \right)^2 \sigma^2 - \frac{1}{3} g_2 \sigma^3 - \frac{1}{4} g_3 \sigma^4 \right] \\ & - \left[\frac{1}{4} \Omega^{\mu\nu} \Omega_{\mu\nu} - \frac{1}{2} \left(\frac{m_\omega c}{\hbar} \right)^2 \omega^\mu \omega_\mu \right] - \left[\frac{1}{4} \mathbf{P}^{\mu\nu} \cdot \mathbf{P}_{\mu\nu} - \frac{1}{2} \left(\frac{m_\rho c}{\hbar} \right)^2 \boldsymbol{\rho}^\mu \cdot \boldsymbol{\rho}_\mu \right] - \frac{1}{4} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} \end{aligned} \quad (2.1)$$

ただし、 $\Omega_{\mu\nu}$, $\mathbf{P}_{\mu\nu}$, $F_{\mu\nu}$ は

$$\Omega_{\mu\nu} = \partial_\mu \omega_\nu - \partial_\nu \omega_\mu, \quad \mathbf{P}_{\mu\nu} = \partial_\mu \boldsymbol{\rho}_\nu - \partial_\nu \boldsymbol{\rho}_\mu, \quad F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu \quad (2.2)$$

である。また定数 $g_\sigma, g_\omega, g_\rho$ は、ディラック場 ψ と中間子場 $\sigma, \omega^\mu, \boldsymbol{\rho}^\mu$ の相互作用の強さを表す結合定数で、 g_2, g_3 は σ 中間子の自己相互作用の強さを表す定数である。 $\boldsymbol{\tau} = (\tau_x, \tau_y, \tau_z)$ はアイソスピン演算子で、 τ_z に対して陽子は固有値 1、中性子は固有値 -1 をもつ。

オイラー・ラグランジュ方程式

$$\partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \phi)} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} = 0 \quad (2.3)$$

から場の方程式を求める。まずディラック場に対しては、(2.3) で $\phi = \bar{\psi}$ とすることでディラック方程式

$$\left[\gamma^\mu \left(i\hbar \partial_\mu - g_\omega \omega_\mu - g_\rho \boldsymbol{\rho}_\mu \cdot \boldsymbol{\tau} - eA_\mu \frac{1 + \tau_z}{2} \right) - (Mc^2 - g_\sigma \sigma) \right] \psi = 0 \quad (2.4)$$

表 1 相対論的な原子核の模型で使われる場とその性質

記号	粒子	質量	アイソスピン	性質
ψ	核子	M	$\frac{1}{2}$	ディラック場
σ	σ 中間子	m_σ	0	スカラー場
ω^μ	ω 中間子	m_ω	0	ベクトル場
π	π 中間子	m_π	1	擬スカラー場
ρ^μ	ρ 中間子	m_ρ	1	ベクトル場
A^μ	光子	0	0	ベクトル場

が得られる。また、 σ 中間子の場の方程式は、ソース項と非線形な自己相互作用項をもつクライン・ゴールドン方程式

$$\left[\partial_\mu \partial^\mu + \left(\frac{m_\sigma c}{\hbar} \right)^2 \right] \sigma + g_2 \sigma^2 + g_3 \sigma^3 = g_\sigma \bar{\psi} \psi \quad (2.5)$$

になる。 ω 中間子に対しては (2.3) で $\phi = \omega_\nu$ とする。まず

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \omega_\nu)} &= -\frac{1}{4} \frac{\partial}{\partial(\partial_\mu \omega_\nu)} (\partial^\alpha \omega^\beta - \partial^\beta \omega^\alpha) (\partial_\alpha \omega_\beta - \partial_\beta \omega_\alpha) \\ &= -(\partial^\mu \omega^\nu - \partial^\nu \omega^\mu) = -\Omega^{\mu\nu} \end{aligned}$$

となるから、これを使うと質量項のあるマクスウェル方程式

$$\partial_\mu \Omega^{\mu\nu} + \left(\frac{m_\omega c}{\hbar} \right)^2 \omega^\nu = g_\omega \bar{\psi} \gamma^\nu \psi \quad (2.6)$$

が得られる。この式の両辺に ∂_ν を作用させると

$$\partial_\nu \partial_\mu (\partial^\mu \omega^\nu - \partial^\nu \omega^\mu) + \left(\frac{m_\omega c}{\hbar} \right)^2 \partial_\nu \omega^\nu = \partial_\nu (g_\omega \bar{\psi} \gamma^\nu \psi)$$

となるが、左辺第 1 項は添え字の入れ替えを行うと 0 になることがわかる。右辺もカレント保存則

$$\partial_\nu (c \bar{\psi} \gamma^\nu \psi) = 0 \quad (2.7)$$

により 0 となるので、 $\partial_\nu \omega^\nu = 0$ という恒等式が成り立つ。この恒等式を (2.6) に用いるとクライン・ゴールドン方程式

$$\left[\partial_\mu \partial^\mu + \left(\frac{m_\omega c}{\hbar} \right)^2 \right] \omega^\nu = g_\omega \bar{\psi} \gamma^\nu \psi \quad (2.8)$$

になる。同様に、 ρ 中間子が満たす方程式もクライン・ゴールドン方程式

$$\left[\partial_\mu \partial^\mu + \left(\frac{m_\rho c}{\hbar} \right)^2 \right] \rho^\nu = g_\rho \bar{\psi} \gamma^\nu \boldsymbol{\tau} \psi \quad (2.9)$$

である。また、 $\phi = A_\nu$ としたオイラー・ラグランジュ方程式からは、マクスウェル方程式

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = e \bar{\psi} \gamma^\nu \frac{1 + \tau_z}{2} \psi \quad (2.10)$$

が得られる。

以上をまとめると、原子核を記述する場の方程式は次のようになる。

$$\left[\gamma^\mu \left(i\hbar \partial_\mu - g_\omega \omega_\mu - g_\rho \boldsymbol{\rho}_\mu \cdot \boldsymbol{\tau} - e A_\mu \frac{1 + \tau_z}{2} \right) - (Mc^2 - g_\sigma \sigma) \right] \psi = 0 \quad (2.11)$$

$$\left[\partial_\mu \partial^\mu + \left(\frac{m_\sigma c}{\hbar} \right)^2 \right] \sigma + g_2 \sigma^2 + g_3 \sigma^3 = g_\sigma \bar{\psi} \psi \quad (2.12)$$

$$\left[\partial_\mu \partial^\mu + \left(\frac{m_\omega c}{\hbar} \right)^2 \right] \omega^\nu = g_\omega \bar{\psi} \gamma^\nu \psi \quad (2.13)$$

$$\left[\partial_\mu \partial^\mu + \left(\frac{m_\rho c}{\hbar} \right)^2 \right] \boldsymbol{\rho}^\nu = g_\rho \bar{\psi} \gamma^\nu \boldsymbol{\tau} \psi \quad (2.14)$$

$$\partial_\mu (\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu) = e \bar{\psi} \gamma^\nu \frac{1 + \tau_z}{2} \psi \quad (2.15)$$

2.2 平均場近似

方程式 (2.11)–(2.15) は、量子化された場に対する非線形な方程式なので、その解を求めることは難しい。そこで、いくつかの近似を行い実際に計算可能な形にする。平均場近似は原子核の基底状態を求めるための近似で、中間子場と電磁場の方程式 (2.12)–(2.15) の右辺のソース項を原子核の基底状態における期待値に置き換える。場の演算子の期待値は古典的な場になるから、(2.12)–(2.15) も古典的な場を決めるための方程式と見なさなければならない。つまり中間子場と電磁場は古典的な場として扱う。以下では、 $\sigma, \omega^\mu, \boldsymbol{\rho}^\mu, A^\mu$ は原子核の基底状態における期待値を表すものとする（平均場）。

原子核の基底状態はパリティの固有状態である。そのため、表 1 にある π 中間子は、平均場近似のもとでは原子核の基底状態に影響しない。なぜならば、パリティ演算子を P とすると、原子核の基底状態 $|0\rangle$ における擬スカラー場 π の期待値は

$$\begin{aligned} \langle 0 | \pi | 0 \rangle &= \langle 0 | P^{-1} P \pi P^{-1} P | 0 \rangle \\ &= (\langle 0 | P^\dagger) (P \pi P^{-1}) (P | 0 \rangle) = -\langle 0 | \pi | 0 \rangle \end{aligned}$$

となって 0 になるからである ($P^{-1} = P = P^\dagger$)。そのため、(2.1) のラグランジアン密度には最初から π を入れなかった。これと同様の議論は、空間反転に対して符号を変えるほかの場についても成り立つから、ベクトル場の空間成分は平均場近似を行うとすべて 0 になる。

$$\omega^k = 0, \quad \boldsymbol{\rho}^k = 0, \quad A^k = 0 \quad (k = 1, 2, 3) \quad (2.16)$$

平均場近似に加えてさらにいくつかの仮定をおく。まず、今考えたいのは定常的な原子核の基底状態であるから、中間子場と電磁場は静的であるとする。この仮定と (2.16) によって、(2.12)–(2.15) は次のように書き換わる。

$$\left[\nabla^2 - \left(\frac{m_\sigma c}{\hbar} \right)^2 \right] \sigma = -g_\sigma \langle 0 | \bar{\psi} \psi | 0 \rangle + g_2 \sigma^2 + g_3 \sigma^3 \quad (2.17)$$

$$\left[\nabla^2 - \left(\frac{m_\omega c}{\hbar} \right)^2 \right] \omega^0 = -g_\omega \langle 0 | \bar{\psi} \gamma^0 \psi | 0 \rangle \quad (2.18)$$

$$\left[\nabla^2 - \left(\frac{m_\rho c}{\hbar} \right)^2 \right] \boldsymbol{\rho}^0 = -g_\rho \langle 0 | \bar{\psi} \gamma^0 \boldsymbol{\tau} \psi | 0 \rangle \quad (2.19)$$

$$\nabla^2 A^0 = -e \langle 0 | \bar{\psi} \gamma^0 \frac{1 + \tau_z}{2} \psi | 0 \rangle \quad (2.20)$$

平均場近似によって、ディラック方程式 (2.11) は量子化された場に関して線形になる。

$$i\hbar\gamma^0\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[-ic\hbar\boldsymbol{\gamma}\cdot\nabla + \gamma^0\left(g_\omega\omega_0 + g_\rho\boldsymbol{\rho}_0\cdot\boldsymbol{\tau} + eA_0\frac{1+\tau_z}{2}\right) + (Mc^2 - g_\sigma\sigma) \right] \psi \quad (2.21)$$

ディラック場を波動関数で展開することを考えると、右辺の括弧内の場はすべて時間に依存しないから、 $u(\mathbf{x})e^{-iEt/\hbar}$ という形の定常解を考えられる。 $u(\mathbf{x})$ は次の固有値方程式を満たすようにする。

$$Hu = Eu$$

$$H = -ic\hbar\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla + \left(g_\omega\omega_0 + g_\rho\boldsymbol{\rho}_0\cdot\boldsymbol{\tau} + eA_0\frac{1+\tau_z}{2}\right) + \beta(Mc^2 - g_\sigma\sigma) \quad (2.22)$$

ただし $\boldsymbol{\alpha}, \beta$ は

$$\boldsymbol{\alpha} = \gamma^0\boldsymbol{\gamma} = \begin{bmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{bmatrix}, \quad \beta = \gamma^0 = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{bmatrix} \quad (2.23)$$

である。したがって、 H の完全系で ψ を展開すると

$$\psi(x) = \sum_{\alpha} a_{\alpha} u_{\alpha}(\mathbf{x}) e^{-i\frac{E_{\alpha}}{\hbar}t} \quad (2.24)$$

となる。ただし、 E_{α}, u_{α} はハミルトニアン H の固有値と固有関数、 α は状態を区別するためのラベル、 a_{α} は状態 α の消滅演算子である。ここで1つ近似を行う。 H の固有関数には負のエネルギーをもつ解もあらわれるが、実際に数値計算を行う場合、このような負エネルギーの状態をきちんと計算に取り入れるのは難しい。そこで、負エネルギーの解は無視して、正エネルギーの解だけを考えるものとする (no-sea 近似)。このとき、核子のエネルギーを最小にする状態は、正エネルギーの状態をエネルギーの小さいほうから順番に選び取っていくことで得られる。そして、この状態が平均場近似のもとで原子核の基底状態を作る [1]。

実際に計算を行う場合、陽子状態と中性子状態はきちんと区別されていたほうが便利である。そこで、一粒子状態 α はアイソスピン演算子 τ_z の固有状態にもなっているとする。このとき、 τ_z はハミルトニアン H と交換するから

$$\boldsymbol{\rho}^0\cdot\boldsymbol{\tau} = \rho_z^0\tau_z \quad (2.25)$$

である。つまり $\rho_x^0 = \rho_y^0 = 0$ とする。

式 (2.17) の右辺にあらわれる $\langle 0|\bar{\psi}\psi|0\rangle$ は波動関数を使って表せる。 $\langle 0|\bar{\psi}\psi|0\rangle$ に (2.24) を代入すると

$$\begin{aligned} \langle 0|\bar{\psi}\psi|0\rangle &= \langle 0|\sum_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger}\bar{u}_{\alpha} e^{i\frac{E_{\alpha}}{\hbar}t} \sum_{\alpha'} a_{\alpha'} u_{\alpha'} e^{-i\frac{E_{\alpha'}}{\hbar}t}|0\rangle \\ &= \sum_{\alpha} \sum_{\alpha'} \bar{u}_{\alpha} u_{\alpha'} e^{i\frac{E_{\alpha}-E_{\alpha'}}{\hbar}t} \langle 0|a_{\alpha}^{\dagger}a_{\alpha'}|0\rangle \end{aligned}$$

となる。ここで添字集合 A を

$$A = \{\alpha \mid \text{正エネルギーの占有状態}\} \quad (2.26)$$

と定義すると

$$\langle 0|a_{\alpha}^{\dagger}a_{\alpha'}|0\rangle = \begin{cases} 1 & \alpha, \alpha' \in A \text{ かつ } \alpha = \alpha' \text{ のとき} \\ 0 & \text{それ以外のとき} \end{cases} \quad (2.27)$$

であるから

$$\langle 0|\bar{\psi}\psi|0\rangle = \sum_{\alpha \in A} \bar{u}_{\alpha} u_{\alpha} \quad (2.28)$$

となる。式 (2.18)–(2.20) にあらわれるほかの期待値についても同様だから、平均場近似のもとで解くべき方程式は次のようになる。

$$Hu_\alpha = E_\alpha u_\alpha \quad (2.29)$$

$$\left[\nabla^2 - \left(\frac{m_\sigma c}{\hbar} \right)^2 \right] \sigma = -g_\sigma \sum_{\alpha \in A} \bar{u}_\alpha u_\alpha + g_2 \sigma^2 + g_3 \sigma^3 \quad (2.30)$$

$$\left[\nabla^2 - \left(\frac{m_\omega c}{\hbar} \right)^2 \right] \omega^0 = -g_\omega \sum_{\alpha \in A} u_\alpha^\dagger u_\alpha \quad (2.31)$$

$$\left[\nabla^2 - \left(\frac{m_\rho c}{\hbar} \right)^2 \right] \rho_z^0 = -g_\rho \sum_{\alpha \in A} u_\alpha^\dagger \tau_z u_\alpha \quad (2.32)$$

$$\nabla^2 A^0 = -e \sum_{\alpha \in A} u_\alpha^\dagger \frac{1 + \tau_z}{2} u_\alpha \quad (2.33)$$

ただし、ハミルトニアン H は

$$H = -i\hbar \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \left(g_\omega \omega^0 + g_\rho \rho_z^0 \tau_z + eA^0 \frac{1 + \tau_z}{2} \right) + \beta (Mc^2 - g_\sigma \sigma) \quad (2.34)$$

である。

2.3 中心力場におけるディラック・ハートリー方程式

あとの電子散乱の解析では、原子核の電荷分布が球対称であるとして計算を行う。そのため、以下では原子核を球対称な系として扱う。

一般の波動関数 $\psi(\mathbf{x})$ に対する次の形のディラック方程式

$$\left[-i\hbar \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + V_0 + \beta (Mc^2 - V_s) \right] \psi = E\psi \quad (2.35)$$

において、ポテンシャルが $V_0 = V_0(r)$, $V_s = V_s(r)$ のように球対称である場合を考える ($r = |\mathbf{x}|$)。角運動量演算子 \mathbf{J} を

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \mathbf{j} & 0 \\ 0 & \mathbf{j} \end{bmatrix} \quad \text{ただし} \quad \mathbf{j} = \mathbf{L} + \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}, \quad \mathbf{L} = -i\hbar \mathbf{x} \times \nabla \quad (2.36)$$

とすると、中心力の場合には、 ψ を \mathbf{J}^2, J_z とパリティ演算子の固有状態にすることができる。 ψ をこれらの固有状態にした場合、ディラック方程式の解は

$$\psi(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{F_\kappa(r)}{r} \mathcal{Y}_{\kappa m}(\hat{\mathbf{x}}) \\ i \frac{G_\kappa(r)}{r} \mathcal{Y}_{-\kappa m}(\hat{\mathbf{x}}) \end{bmatrix} \quad (2.37)$$

という形に書ける [1, 2]。この式で、 $\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x}/r$ は径方向の単位ベクトルを表し、球面調和スピノール $\mathcal{Y}_{\kappa m}(\hat{\mathbf{x}})$ は $\mathbf{L}^2, \mathbf{j}^2, j_z$ の同時固有関数である。 κ は \mathbf{L}^2 の固有値 ℓ と \mathbf{j}^2 の固有値 j をまとめて表した量子数で、 κ と (ℓ, j) の関係は

$$\kappa = \begin{cases} \ell & j = \ell - 1/2 \text{ のとき} \\ -(\ell + 1) & j = \ell + 1/2 \text{ のとき} \end{cases} \quad (2.38)$$

である。この式より κ が 0 以外の整数値をとることがわかる。もう 1 つの量子数 m は j_z の固有値である。式 (2.37) の中で最も重要なのは、動径方向の波動関数 $F_\kappa(r)$, $G_\kappa(r)$ で、これらは動径方向のディラック方程式

$$\frac{d}{dr} F_\kappa(r) = -\frac{\kappa}{r} F_\kappa(r) + \frac{Mc^2 - V_s(r) + E - V_0(r)}{c\hbar} G_\kappa(r) \quad (2.39)$$

$$\frac{d}{dr} G_\kappa(r) = \frac{\kappa}{r} G_\kappa(r) + \frac{Mc^2 - V_s(r) - E + V_0(r)}{c\hbar} F_\kappa(r) \quad (2.40)$$

を満足する。 $F_\kappa(r)$, $G_\kappa(r)$ は実数値関数にすることができる。また、 J_z の固有値 m にはよらない。波動関数の規格化条件は

$$\begin{aligned} \psi^\dagger(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) &= \begin{bmatrix} \frac{F_\kappa(r)}{r} \mathcal{Y}_{\kappa m}^\dagger(\hat{\mathbf{x}}) & -i \frac{G_\kappa(r)}{r} \mathcal{Y}_{-\kappa m}^\dagger(\hat{\mathbf{x}}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{F_\kappa(r)}{r} \mathcal{Y}_{\kappa m}(\hat{\mathbf{x}}) \\ i \frac{G_\kappa(r)}{r} \mathcal{Y}_{-\kappa m}(\hat{\mathbf{x}}) \end{bmatrix} \\ &= \frac{F_\kappa(r)^2}{r^2} \mathcal{Y}_{\kappa m}^\dagger(\hat{\mathbf{x}}) \mathcal{Y}_{\kappa m}(\hat{\mathbf{x}}) + \frac{G_\kappa(r)^2}{r^2} \mathcal{Y}_{-\kappa m}^\dagger(\hat{\mathbf{x}}) \mathcal{Y}_{-\kappa m}(\hat{\mathbf{x}}) \end{aligned}$$

より

$$\begin{aligned} 1 &= \int \psi^\dagger(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) d^3x \\ &= \int_0^\infty \frac{F_\kappa(r)^2}{r^2} r^2 dr \int \mathcal{Y}_{\kappa m}^\dagger(\hat{\mathbf{x}}) \mathcal{Y}_{\kappa m}(\hat{\mathbf{x}}) d\Omega + \int_0^\infty \frac{G_\kappa(r)^2}{r^2} r^2 dr \int \mathcal{Y}_{-\kappa m}^\dagger(\hat{\mathbf{x}}) \mathcal{Y}_{-\kappa m}(\hat{\mathbf{x}}) d\Omega \\ &= \int_0^\infty \left(F_\kappa(r)^2 + G_\kappa(r)^2 \right) dr \end{aligned} \quad (2.41)$$

となる。

以上を使ってディラック・ハートリー方程式 (2.29)–(2.34) を動径成分だけの方程式にする。まず、原子核は球対称としているので、 σ , ω^0 , ρ_z^0 , A^0 は r だけの関数と考えてよい。するとディラック方程式 (2.29) は、中心力の一般式 (2.35) とほとんど同じ形になるので、 u_α を角運動量とパリティの固有状態にできる。

$$u_\alpha(\mathbf{x}) = u_{\tau n \kappa m}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{F_{\tau n \kappa}(r)}{r} \mathcal{Y}_{\kappa m}(\hat{\mathbf{x}}) \\ i \frac{G_{\tau n \kappa}(r)}{r} \mathcal{Y}_{-\kappa m}(\hat{\mathbf{x}}) \end{bmatrix} \chi_\tau \quad (2.42)$$

ただし、核子はアイソスピン 1/2 をもっており、アイソスピンの状態に関しては τ_z の固有状態にとることになっているから、 u_α をディラックスピノールとアイソスピノール χ_τ のテンソル積にしてある ($\chi_\tau^\dagger \chi_\tau = 1$)。量子数 τ は τ_z の固有値を表し、陽子ならば $\tau = 1$ 、中性子ならば $\tau = -1$ である。また n は、動径方向のディラック方程式を解いたときに出てくるいくつかのエネルギー固有値を区別するための量子数である。この表示を使って (2.31) の右辺に出てくる $\sum_{\alpha \in A} u_\alpha^\dagger u_\alpha$ を計算すると

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha \in A} u_\alpha^\dagger u_\alpha &= \sum_{\tau n \kappa m} \begin{bmatrix} \frac{F_{\tau n \kappa}}{r} \mathcal{Y}_{\kappa m}^\dagger & -i \frac{G_{\tau n \kappa}}{r} \mathcal{Y}_{-\kappa m}^\dagger \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{F_{\tau n \kappa}}{r} \mathcal{Y}_{\kappa m} \\ i \frac{G_{\tau n \kappa}}{r} \mathcal{Y}_{-\kappa m} \end{bmatrix} \chi_\tau^\dagger \chi_\tau \\ &= \sum_{\tau n \kappa m} \left(\frac{F_{\tau n \kappa}^2}{r^2} \mathcal{Y}_{\kappa m}^\dagger \mathcal{Y}_{\kappa m} + \frac{G_{\tau n \kappa}^2}{r^2} \mathcal{Y}_{-\kappa m}^\dagger \mathcal{Y}_{-\kappa m} \right) \end{aligned} \quad (2.43)$$

となる。今考えている原子核の基底状態では、エネルギーの低い状態から順に核子が入っているから、最もエネルギーの高い準位を除けば、それより下の m について縮退した準位にはすべて核子が入っている。このような準位に対しては、上の式の m に関する和を計算によって求めることができる。 j_z の固有値 m が等しい状態は全部で $2j + 1$ 個あるから

$$\begin{aligned} \sum_{m=-j}^j \mathcal{Y}_{\ell jm}^\dagger(\hat{\boldsymbol{x}}) \mathcal{Y}_{\ell jm}(\hat{\boldsymbol{x}}) &= \sum_{m=-j}^j \left(\sum_{m_\ell=-\ell}^{\ell} \sum_{m_s=\pm\frac{1}{2}} \langle \ell m_\ell; \frac{1}{2} m_s | j m \rangle Y_{\ell m_\ell}^*(\hat{\boldsymbol{x}}) \chi_{m_s}^\dagger \right) \\ &\quad \times \left(\sum_{m'_\ell=-\ell}^{\ell} \sum_{m'_s=\pm\frac{1}{2}} \langle \ell m'_\ell; \frac{1}{2} m'_s | j m \rangle Y_{\ell m'_\ell}(\hat{\boldsymbol{x}}) \chi_{m'_s} \right) \\ &= \sum_{mm'_\ell m'_s} \langle \ell m_\ell; \frac{1}{2} m_s | j m \rangle \langle \ell m'_\ell; \frac{1}{2} m'_s | j m \rangle Y_{\ell m_\ell}^* Y_{\ell m'_\ell} \end{aligned}$$

となる。ただし、 κ は (2.38) によって (ℓ, j) と 1 対 1 に対応しているので、 $\mathcal{Y}_{\kappa m}$ を $\mathcal{Y}_{\ell jm}$ と表し、クレブシュ・ゴルダン係数を使って球面調和関数とパウリスピノール ($\chi_{m_s}^\dagger \chi_{m'_s} = \delta_{m_s m'_s}$) に展開した。ここで、クレブシュ・ゴルダン係数の対称性 [3]

$$\langle j_1 m_1; j_2 m_2 | j_3 m_3 \rangle = (-1)^{j_2+m_2} \sqrt{\frac{2j_3+1}{2j_1+1}} \langle j_2 -m_2; j_3 m_3 | j_1 m_1 \rangle \quad (2.44)$$

を使うと

$$\begin{aligned} \sum_{m=-j}^j \mathcal{Y}_{\ell jm}^\dagger(\hat{\boldsymbol{x}}) \mathcal{Y}_{\ell jm}(\hat{\boldsymbol{x}}) &= \sum_{mm'_\ell m'_s} (-1)^{1+2m_s} \frac{2j+1}{2\ell+1} \langle \frac{1}{2} -m_s; j m | \ell m_\ell \rangle \langle \frac{1}{2} -m_s; j m | \ell m'_\ell \rangle Y_{\ell m_\ell}^* Y_{\ell m'_\ell} \\ &= \frac{2j+1}{2\ell+1} \sum_{m_\ell m'_\ell} Y_{\ell m_\ell}^* Y_{\ell m'_\ell} \left(\sum_{m=-j}^j \sum_{m_s=\pm\frac{1}{2}} \langle \frac{1}{2} m_s; j m | \ell m_\ell \rangle \langle \frac{1}{2} m_s; j m | \ell m'_\ell \rangle \right) \\ &= \frac{2j+1}{2\ell+1} \sum_{m_\ell m'_\ell} Y_{\ell m_\ell}^* Y_{\ell m'_\ell} \delta_{m_\ell m'_\ell} \\ &= \frac{2j+1}{2\ell+1} \sum_{m_\ell=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m_\ell}^*(\hat{\boldsymbol{x}}) Y_{\ell m_\ell}(\hat{\boldsymbol{x}}) \end{aligned}$$

となる。最後に、球面調和関数の加法定理

$$P_\ell(\hat{\boldsymbol{x}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{x}}_2) = \frac{4\pi}{2\ell+1} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m}^*(\hat{\boldsymbol{x}}_1) Y_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{x}}_2) \quad (2.45)$$

とルジャンドル多項式の性質 $P_\ell(1) = 1$ を使えば

$$\sum_{m=-j}^j \mathcal{Y}_{\ell jm}^\dagger(\hat{\boldsymbol{x}}) \mathcal{Y}_{\ell jm}(\hat{\boldsymbol{x}}) = \frac{2j+1}{4\pi} \quad (2.46)$$

を得る。そして、この結果を (2.43) に代入すれば

$$\sum_{\alpha \in A} u_\alpha^\dagger u_\alpha = \sum_{\tau n \kappa} \frac{2j+1}{4\pi r^2} [F_{\tau n \kappa}(r)^2 + G_{\tau n \kappa}(r)^2] \quad (2.47)$$

となる。この式は、 m について縮退した $2j+1$ 個の状態に空きがないときに使えるものである。しかし、すべての m が満たされていない準位に対しても、式の中の $2j+1$ をその準位を占有している核子数に置き換えれば、(2.47) を近似式として使うことができる。 u_α のほかの形の和についても (2.47) と同様の結果が導ける。

$$\sum_{\alpha \in A} \bar{u}_\alpha u_\alpha = \sum_{\tau n \kappa} \frac{2j+1}{4\pi r^2} [F_{\tau n \kappa}(r)^2 - G_{\tau n \kappa}(r)^2] \quad (2.48)$$

$$\sum_{\alpha \in A} u_\alpha^\dagger \tau_z u_\alpha = \sum_{\tau n \kappa} \frac{2j+1}{4\pi r^2} [F_{\tau n \kappa}(r)^2 + G_{\tau n \kappa}(r)^2] \tau \quad (2.49)$$

$$\sum_{\alpha \in A} u_\alpha^\dagger \frac{1+\tau_z}{2} u_\alpha = \sum_{\tau n \kappa} \frac{2j+1}{4\pi r^2} [F_{\tau n \kappa}(r)^2 + G_{\tau n \kappa}(r)^2] \frac{1+\tau}{2} \quad (2.50)$$

n, κ についての和は、エネルギーの小さい状態から順番に $\tau=1$ ならば陽子の数だけ、 $\tau=-1$ ならば中性子の数だけとる。

以上の結果をまとめると、中心力場におけるディラック・ハートリー方程式は次のようになる。

$$\frac{d}{dr} F_\alpha(r) = -\frac{\kappa}{r} F_\alpha(r) + \frac{Mc^2 - V_s(r) + E_\alpha - V_0(r)}{c\hbar} G_\alpha(r) \quad (2.51)$$

$$\frac{d}{dr} G_\alpha(r) = \frac{\kappa}{r} G_\alpha(r) + \frac{Mc^2 - V_s(r) - E_\alpha + V_0(r)}{c\hbar} F_\alpha(r) \quad (2.52)$$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \left(\frac{m_\sigma c}{\hbar} \right)^2 \right] \sigma(r) = -g_\sigma \rho_s(r) + g_2 \sigma(r)^2 + g_3 \sigma(r)^3 \quad (2.53)$$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \left(\frac{m_\omega c}{\hbar} \right)^2 \right] \omega^0(r) = -g_\omega \rho_b(r) \quad (2.54)$$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \left(\frac{m_\rho c}{\hbar} \right)^2 \right] \rho_z^0(r) = -g_\rho \rho_t(r) \quad (2.55)$$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right] A^0(r) = -e\rho_p(r) \quad (2.56)$$

ただし

$$V_s(r) = g_\sigma \sigma(r), \quad V_0(r) = g_\omega \omega^0(r) + g_\rho \rho_z^0(r) \tau + eA^0(r) \frac{1+\tau}{2} \quad (2.57)$$

これらの式において $\rho_b(r)$, $\rho_s(r)$, $\rho_t(r)$, $\rho_p(r)$ は (2.47)–(2.50) で与えられる密度関数を表し、それぞれバリオン密度、ローレンツスカラーの密度、アイソスピンに依存する密度、陽子密度である。また量子数 $\alpha = (\tau, n, \kappa, m)$ は、エネルギー固有値や動径方向の波動関数に対しては $E_\alpha = E_{\tau n \kappa}$, $F_\alpha(r) = F_{\tau n \kappa}(r)$, $G_\alpha(r) = G_{\tau n \kappa}(r)$ を意味するものとする。

2.4 ディラック・ハートリー方程式の計算方法

中心力の場合のディラック・ハートリー方程式 (2.51)–(2.57) を数値的に解く方法について簡単に述べる。

まず、数値計算を行うためには中間子の質量や結合定数の値が必要になる。ラグランジアンに含まれるパラメーターは、中間子の質量 m_σ , m_ω , m_ρ と結合定数 g_σ , g_ω , g_ρ , g_2 , g_3 の合計 8 つで、これらは原子核の基本的な性質（束縛エネルギーなど）を再現するようにして決める。パラメーターセットとしていろいろなものが

表 2 NL3

M (MeV)	m_σ (MeV)	m_ω (MeV)	m_ρ (MeV)	g_σ	g_ω	g_ρ	g_2 (fm $^{-1}$)	g_3
939	508.194	782.501	763.000	10.217	12.868	4.474	-10.431	-28.885

作られているが [4, 5]、そのうちの 1 つである NL3 [6] を表 2 に示す。ただし、表中の数値はそれぞれのパラメーターに c や \hbar を適当にかけた場合のものである。

方程式 (2.51)–(2.57) では、ディラック方程式が固有値問題になっているので、直接的に解くことはできないが、繰り返し計算を行えば解くことができる。計算の手順としては、まず最初に中間子場を決定するクライン・ゴルドン方程式を解く。そのためには、ディラック方程式を解くことで求まる 4 種類の密度 $\rho_b(r)$, $\rho_s(r)$, $\rho_t(r)$, $\rho_p(r)$ が必要になるが、最初だけは適当な関数形を仮定して解く。最終的に求まる密度分布は図 1 のようなものになるので、 $\rho_b(r)$ には

$$\rho_b(r) = \frac{\rho_0}{1 + e^{\frac{r-R}{a}}} \quad (2.58)$$

$$\rho_0 \approx 0.16 \text{ fm}^{-3}, \quad R \approx 1.1 A^{\frac{1}{3}} \text{ fm}, \quad a \approx 0.6 \text{ fm}$$

という関数を与えればよい。ただし A は核子数である。残りの 3 つの密度関数は、 Z を陽子数、 N を中性子数として

$$\rho_s(r) = 0.95 \rho_b(r), \quad \rho_t(r) = \frac{Z - N}{A} \rho_b(r), \quad \rho_p(r) = \frac{Z}{A} \rho_b(r) \quad (2.59)$$

のようにとる。これらを使うと中間子場と電磁場の方程式 (2.53)–(2.56) が数値的に計算できるようになるので、その結果を使ってディラック方程式のポテンシャル (2.57) を求め、ディラック方程式 (2.51), (2.52) を解く。これによって $F_\alpha(r)$, $G_\alpha(r)$ が求まるが、これらは最初に与えた密度関数が正しくないために連立微分方程式 (2.51)–(2.57) を満足する解にはなっていない。そこで、より正確な解を求めるために、求まった

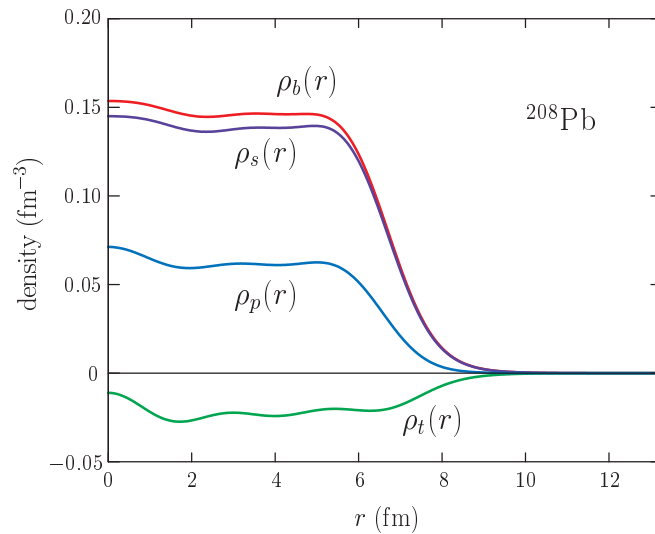


図 1 4 種類の密度 (^{208}Pb)

$F_\alpha(r)$, $G_\alpha(r)$ から (2.47)–(2.50) の 4 つの密度分布を計算し、中間子場・電磁場の方程式とディラック方程式を改めて解き直す。このようにして求めた新しい解は、正確な解により近づいていることが多く、同じ計算を繰り返すことで解の精度をどんどんよくしていける。最終的には、解がほとんど変化しなくなったところで計算をやめる。20~30 回程度の繰り返しを行えば十分な精度の解が得られる。

以下では、微分方程式 (2.51)–(2.57) を数値的に解くときの注意点について述べる。

中間子場の方程式 (2.54), (2.55) と同じ形の微分方程式

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - k^2 \right] \phi(r) = -g\rho(r) \quad (k > 0) \quad (2.60)$$

を数値的に解くことを考える。ただし、 $\phi(r)$ は中間子場に対応した未知関数で $\rho(r)$ は既知の関数である。この微分方程式を変形すると次のようになる。

$$\left[\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r - k^2 \right] \phi(r) = -g\rho(r)$$

したがって、 $r\phi(r) = f(r)$ とおけば

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - k^2 \right] f(r) = -r(g\rho(r)) \quad (2.61)$$

という形になる。 $\phi(r) = f(r)/r$ が有界となるような解を求めたいので、 $f(r)$ に対する $r \rightarrow 0$ での境界条件は

$$\lim_{r \rightarrow 0} f(r) = 0 \quad (2.62)$$

である。また、 $r \rightarrow \infty$ での境界条件を考えると、核子がない遠方では中間子場も 0 になるはずだから

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{f(r)}{r} = 0 \quad (2.63)$$

がわかる。これらの境界条件のもとで微分方程式 (2.61) を数値的に解けばよいが、境界条件が領域の両端で与えられているため少し解きにくい。そこで、微分方程式 (2.61)–(2.63) のグリーン関数を利用して解を求める。グリーン関数 $f_G(r)$ は、境界条件 (2.62), (2.63) と次の微分方程式を満足する。

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - k^2 \right] f_G(r) = -\delta(r - r') \quad (r' > 0) \quad (2.64)$$

この微分方程式の解は、 $r \neq r'$ では簡単に求めることができ

$$f_G(r) = Ae^{kr} + Be^{-kr}$$

となる。境界条件を考慮すると、 $r = 0$ の近傍では $\sinh kr$ が解となり、 $r = \infty$ の近傍では e^{-kr} が解となる。したがって

$$f_G(r) = \begin{cases} A \sinh kr & (r < r') \\ Be^{-kr} & (r > r') \end{cases} \quad (2.65)$$

は境界条件を満たし、領域 $r > 0$ のほとんど至る所で微分方程式 (2.64) の解になっている。そこで、定数 A, B をうまく選んで (2.65) がすべての点で解になるようにする。まず、(2.64) の両辺を $r = r' - \varepsilon$ から $r = r' + \varepsilon$ まで積分して $\varepsilon \rightarrow 0$ とすると

$$\frac{df_G}{dr}(r' + 0) - \frac{df_G}{dr}(r' - 0) = -1 \quad (2.66)$$

という条件が得られる。したがって

$$kA \cosh kr' + kB e^{-kr'} = 1 \quad (2.67)$$

が成り立たなければならない。また、 f_G がすべての点で連続になるようにすると

$$A \sinh kr' - B e^{-kr'} = 0 \quad (2.68)$$

という条件がつくので、(2.67), (2.68) を A, B について解くとグリーン関数は

$$f_G(r, r') = \begin{cases} \frac{\sinh kr e^{-kr'}}{k} & (r < r') \\ \frac{\sinh kr' e^{-kr}}{k} & (r > r') \end{cases} \quad (2.69)$$

という形になる。ただし、 r' を f_G の引数とした。このグリーン関数を使えば、微分方程式 (2.61) の境界条件を満たす解は

$$f(r) = \int_0^\infty f_G(r, r') g\rho(r') r' dr' \quad (2.70)$$

となる。もとの記号 $\phi(r) = f(r)/r$ を使って表せば

$$\phi(r) = \int_0^\infty \phi_G(r, r') g\rho(r') r'^2 dr' \quad (2.71)$$

ただし

$$\phi_G(r, r') = \begin{cases} \frac{\sinh kr e^{-kr'}}{krr'} & (r < r') \\ \frac{\sinh kr' e^{-kr}}{krr'} & (r > r') \end{cases} \quad (2.72)$$

である。このグリーン関数は $k > 0$ の中間子に対するものであるが、 $k = 0$ の光子のグリーン関数も同じ方法で求められる。結果は、(2.72) で $k \rightarrow 0$ の極限をとったものになる。

以上のグリーン関数を用いた方法は、 σ 中間子以外に対してはそのまま使える。 σ 中間子の微分方程式 (2.53) には、非線形の自己相互作用項が含まれているため、上のグリーン関数をそのまま使うことはできない。しかし

$$-g_\sigma \rho_s(r) + g_2 \sigma(r)^2 + g_3 \sigma(r)^3 \quad (2.73)$$

を改めて $-g_\sigma \rho_s(r)$ とみなせば同じ方法が使える。そのためには未知の $\sigma(r)$ が必要となるが、それには繰り返し計算の1つ前の回に求めた $\sigma(r)$ を使えばよい。より正確に求めるには、このようなグリーン関数計算によって求めた $\sigma(r)$ を再び (2.73) に代入し、それを新しい $-g_\sigma \rho_s(r)$ とみなして同じグリーン関数計算を繰り返す。非線形微分方程式を満足する $\sigma(r)$ を十分な精度で求めるためには、この計算を5回程度繰り返せばよい。ハートリー計算の1回目だけは1つ前の回の $\sigma(r)$ がないので、 $\sigma(r)$ の関数形を適当に仮定して計算に使う。最終的に求まる $\sigma(r)$ は図2のような形になる。

次に、ディラック方程式 (2.51), (2.52) を数値的に解くこと考える。これを解くには、 $r = 0$ の近くから $r \rightarrow \infty$ に向けて解いた関数と、 r が十分大きいところから $r = 0$ に向けて解いた関数がなめらかにつながる E_α を探し、それに対応する波動関数を求めればよい。この方法を使う場合、境界において $F_\alpha(r), G_\alpha(r)$ の初期値が必要になるので、それを求める。

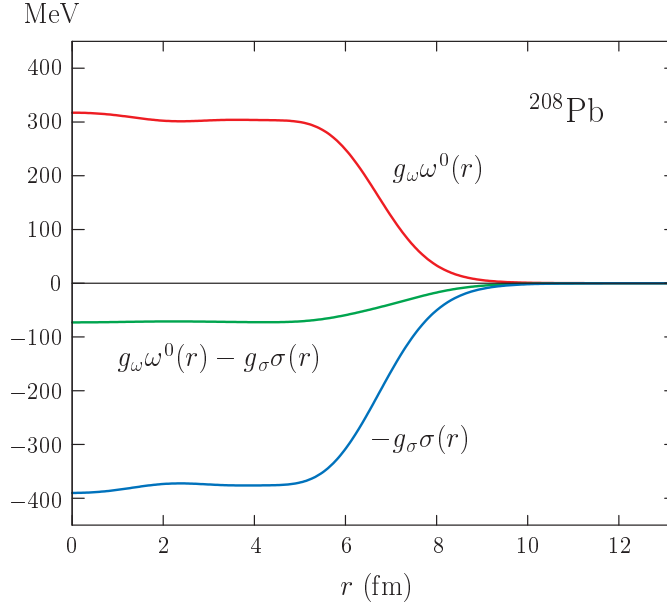


図2 $\sigma(r)$ と $\omega^0(r)$ (^{208}Pb)

まず $r = 0$ での波動関数の初期値を与える。 $r \simeq 0$ のとき、ディラック方程式 (2.51), (2.52) は次の微分方程式とほとんど同じになる。

$$\frac{d}{dr}F_\alpha(r) = -\frac{\kappa}{r}F_\alpha(r), \quad \frac{d}{dr}G_\alpha(r) = \frac{\kappa}{r}G_\alpha(r) \quad (2.74)$$

$r \rightarrow 0$ では、 A, B, a, b を定数として、波動関数を $F_\alpha(r) = Ar^a$, $G_\alpha(r) = Br^b$ と表せるので、これらを (2.74) に代入すると

$$a = -\kappa, \quad b = \kappa$$

という関係式が求まる。波動関数は有界だから、(2.42) より、 $F_\alpha(r)$, $G_\alpha(r)$ は $r = 0$ の近傍で r と同じかそれよりはやく 0 にいかなければならない。したがって、 κ が 0 以外の整数であることを考慮すると、 $r \rightarrow 0$ での $F_\alpha(r)$, $G_\alpha(r)$ の漸近形は

$$\begin{aligned} \kappa < 0 \text{ ならば } & F_\alpha(r) = Ar^{-\kappa}, \quad G_\alpha(r) = 0 \\ \kappa > 0 \text{ ならば } & F_\alpha(r) = 0, \quad G_\alpha(r) = Br^\kappa \end{aligned} \quad (2.75)$$

となる。 $\kappa < 0$ のときに $G_\alpha(r)$ が 0 になっているが、これは $r \rightarrow 0$ で $G_\alpha(r)$ が $F_\alpha(r)$ よりもはやく 0 にくためである。漸近形をもっとよく求めるためには、動径方向のディラック方程式の正確な式

$$\left(\frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r}\right)F_\alpha(r) = \frac{Mc^2 - V_s(r) + E_\alpha - V_0(r)}{c\hbar}G_\alpha(r) \quad (2.76)$$

$$\left(\frac{d}{dr} - \frac{\kappa}{r}\right)G_\alpha(r) = \frac{Mc^2 - V_s(r) - E_\alpha + V_0(r)}{c\hbar}F_\alpha(r) \quad (2.77)$$

を用いる。 $\kappa < 0$ の場合には、(2.77) に $F_\alpha(r) = Ar^{-\kappa}$, $G_\alpha(r) = Br^b$ を代入することで

$$(b - \kappa)Br^{b-1} = \frac{Mc^2 - V_s(r) - E_\alpha + V_0(r)}{c\hbar}Ar^{-\kappa}$$

という、 $r \rightarrow 0$ で漸近的に成り立つ等式が得られる。両辺の r の指数を比較すると $b = -\kappa + 1$ がわかり、これを使って

$$B = \frac{Mc^2 - V_s(r) - E_\alpha + V_0(r)}{(-2\kappa + 1)c\hbar} A$$

を得る。したがって、 $\kappa < 0$ の場合の $r \rightarrow 0$ での漸近形は

$$F_\alpha(r) = (kr)^{-\kappa}, \quad G_\alpha(r) = \frac{Mc^2 - V_s(0) - E_\alpha + V_0(0)}{(-2\kappa + 1)c\hbar k} (kr)^{-\kappa+1} \quad (2.78)$$

となる。ただし k は適当な定数である。 $\kappa > 0$ の場合も同様で、(2.76) に $F_\alpha(r) = Ar^a$, $G_\alpha(r) = Br^\kappa$ を代入すると、 $r \rightarrow 0$ での漸近形は

$$F_\alpha(r) = (kr)^{\kappa+1}, \quad G_\alpha(r) = \frac{(2\kappa + 1)c\hbar k}{Mc^2 - V_s(0) + E_\alpha - V_0(0)} (kr)^\kappa \quad (2.79)$$

となる。数値計算で $r = 0$ の近くから遠方に向けて微分方程式を解くときには、これらを $F_\alpha(r)$, $G_\alpha(r)$ の初期値として使えばよい。

次に遠方での境界条件と漸近形を考える。 $r \rightarrow \infty$ での境界条件は、遠方に核子がないことから、(2.42) の $u_\alpha(\mathbf{x})$ が 0 になるように

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{F_\alpha(r)}{r} = 0, \quad \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{G_\alpha(r)}{r} = 0 \quad (2.80)$$

とする。 $r \rightarrow \infty$ では、ポテンシャル $V_s(r)$, $V_0(r)$ が 0 になるから、ディラック方程式 (2.76), (2.77) は遠方で

$$\frac{d}{dr} F_\alpha(r) = \frac{Mc^2 + E_\alpha}{c\hbar} G_\alpha(r), \quad \frac{d}{dr} G_\alpha(r) = \frac{Mc^2 - E_\alpha}{c\hbar} F_\alpha(r) \quad (2.81)$$

となる。この微分方程式は簡単に解くことができ

$$F_\alpha(r) = Ce^{-kr}, \quad G_\alpha(r) = De^{-kr} \quad \left(k = \frac{\sqrt{M^2c^4 - E_\alpha^2}}{c\hbar} \right) \quad (2.82)$$

という解が求まる。これらを (2.81) に代入すると、定数 C, D の関係が

$$-kC = \frac{Mc^2 + E_\alpha}{c\hbar} D$$

となるのがわかるので、 $r \rightarrow \infty$ での漸近形

$$F_\alpha(r) = e^{-kr}, \quad G_\alpha(r) = -\frac{c\hbar k}{Mc^2 + E_\alpha} e^{-kr} \quad (2.83)$$

が求まる。数値計算を行う場合、これらを遠方での $F_\alpha(r)$, $G_\alpha(r)$ の初期値としてもよいが、この漸近形は $r \rightarrow 0$ のときの漸近形のようにいつでも使えるわけではない。

式 (2.83) を見るとわかるように、束縛状態の解 F_α と G_α の符号は、十分遠方においては必ず互いに逆になる。したがって、遠方での F_α, G_α とその傾き F'_α, G'_α は

$$F_\alpha > 0, \quad G_\alpha < 0, \quad F'_\alpha < 0, \quad G'_\alpha > 0 \quad (2.84)$$

という条件を必ず満たしている (図 3)。ただし、遠方で $F_\alpha > 0$ となるように波動関数の位相を選んだ。この条件は束縛状態の解ならば必ず満足するものだが、数値的にディラック方程式を解く場合、遠方での波動関数の初期値の与え方が悪いと、条件を満たさない解が求まることがある。これを見るために、遠方での波動関

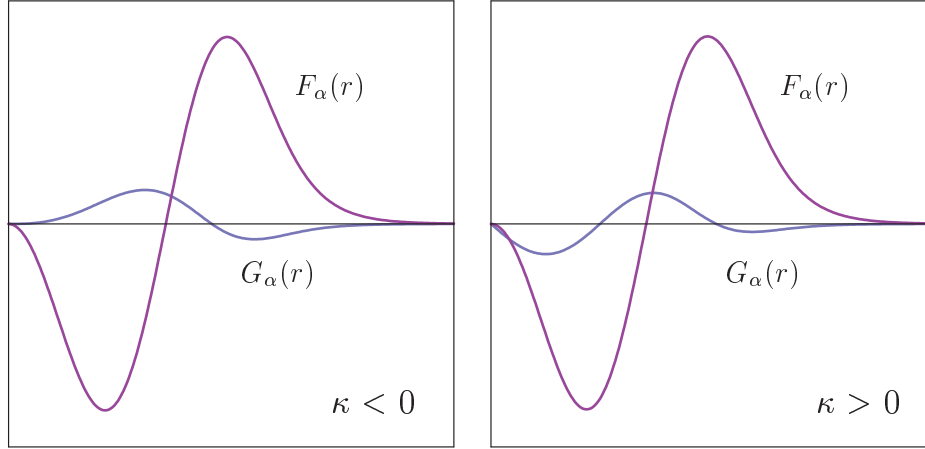


図3 $F_\alpha(r)$ と $G_\alpha(r)$ のグラフ

数の初期値を (2.83) で与えた場合を考えてみる。この場合、(2.84) の最初の 2 つの条件は常に満たされているが、傾きについての条件は満たさなくなることがある。数値計算で微分方程式を解く場合、未知関数の微分係数は微分方程式によって与えられるから、今の場合にはディラック方程式

$$F'_\alpha(R) = -\frac{\kappa}{R} F_\alpha(R) + \frac{Mc^2 - V_s(R) + E_\alpha - V_0(R)}{c\hbar} G_\alpha(R)$$

$$G'_\alpha(R) = \frac{\kappa}{R} G_\alpha(R) + \frac{Mc^2 - V_s(R) - E_\alpha + V_0(R)}{c\hbar} F_\alpha(R)$$

の右辺を計算して求める。ただし、 R は微分方程式を解き始める遠方の点の座標である。簡単のために中性子の波動関数を考えることにすると、クーロンポテンシャルがないので $V_s(R) = V_0(R) = 0$ としてよい。このとき、右辺の $F_\alpha(R)$, $G_\alpha(R)$ に (2.83) を代入すると

$$F'_\alpha(R) = -\frac{\kappa}{R} e^{-kR} + \frac{Mc^2 + E_\alpha}{c\hbar} \left(-\frac{c\hbar k}{Mc^2 + E_\alpha} e^{-kR} \right)$$

$$G'_\alpha(R) = \frac{\kappa}{R} \left(-\frac{c\hbar k}{Mc^2 + E_\alpha} e^{-kR} \right) + \frac{Mc^2 - E_\alpha}{c\hbar} e^{-kR}$$

となる。そして、これを計算すると波動関数の傾きは

$$F'_\alpha(R) = -ke^{-kR} \left(1 + \frac{\kappa}{kR} \right) \quad (2.85)$$

$$G'_\alpha(R) = \frac{Mc^2 - E_\alpha}{c\hbar} e^{-kR} \left(1 - \frac{\kappa}{kR} \right) \quad (2.86)$$

となる。束縛状態では $Mc^2 - E_\alpha > 0$ なので、 $|\kappa/kR| < 1$ となる場合には条件 (2.84) がすべて満たされる。しかし、 R が小さい場合や束縛が浅くて k が小さい場合には、 $|\kappa/kR| > 1$ となって $F'_\alpha(R)$ や $G'_\alpha(R)$ が条件を満たさなくなる。傾きについての条件を満たさない場合、そのような初期値を使って求めた波動関数は、遠方に行くにしたがって振幅が大きくなっていくから、明らかに境界条件を満足していない。したがって、浅い束縛状態を求める場合には漸近形 (2.83) が使えなくなるので、別の初期値を考えなければならない。

束縛エネルギーが小さい状態を正しく求めたい場合には、 F_α, G_α の初期値が (2.84) の条件を満たしているかきちんとチェックしなければならない。しかし、そのような束縛の浅い状態まで必要になることは少ないの

で、(2.83) の代わりに次の漸近形を使うようにすれば、ほとんど問題は起こらない。

$$F_{\alpha}(r) = e^{-kr}, \quad G_{\alpha}(r) = -\frac{c\hbar k}{Mc^2 + E_{\alpha}} \left(1 - \frac{\kappa}{kr}\right) e^{-kr} \quad (2.87)$$

この漸近形は、(2.82) で求めた漸近形 $F_{\alpha}(r) = e^{-kr}$ を正確なディラック方程式

$$\left(\frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r}\right) F_{\alpha}(r) = \frac{Mc^2 - V_s(r) + E_{\alpha} - V_0(r)}{c\hbar} G_{\alpha}(r)$$

に代入し、 $G_{\alpha}(r)$ について解いたあと $V_s(r) = V_0(r) = 0$ として得られる。この漸近形は最初に求めた漸近形 (2.83) よりもよいが、束縛エネルギーが非常に小さい場合には (2.84) の条件を満たさなくなることがある。

3 原子核の電荷分布

ディラック・ハートリー方程式から求めた核子の密度分布を使って、原子核の電荷分布を計算する。水素原子の場合には、軌道電子の電荷密度と波動関数から求めた確率密度が比例するが、原子核の場合には電荷密度と陽子密度は同じにならない。このようなことが起こるのは、核子が電子のような点粒子でなく、構造や広がりをもっているためである。正確に原子核の電荷分布を求めるためには、中間子交換による電流なども考慮しているいろいろな補正を行わなければならないが [7]、ここでは最も大きな変化を与える核子の広がりや異常磁気モーメントの効果を考慮して原子核の電荷分布を計算する。

3.1 核子の形状因子

原子核だけでなく、核子そのものも広がりをもった粒子であることが、高エネルギーの電子散乱の実験などからわかっている。このような核子の広がりが電荷分布へ及ぼす影響は、次のようにして取り入れられる。陽子の中心からの電荷の広がりを表す分布関数を $f(r)$ とおく。ただし、 $f(r)$ は陽子の全電荷が e となるように

$$\int f(r) d^3x = 1 \quad (3.1)$$

と規格化されているとする。量子数 $\alpha = (\tau, n, \kappa, m)$ をもつ陽子状態の存在確率の密度 ρ_α は、波動関数を使って $\rho_\alpha = u_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) u_\alpha(\mathbf{x})$ と表すことができるが、この ρ_α と電荷の広がりを表す分布関数 f を使うと点 \mathbf{x} における原子核の電荷密度 $\rho_c(\mathbf{x})$ を求めることができる。ただし、電荷密度を電気素量 e で割ったものを ρ_c としているので、 ρ_c の次元は通常の密度と同じである。ある陽子が位置 \mathbf{x}' にいる場合、その陽子による \mathbf{x} での電荷密度は $f(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|)$ となるが、実際に陽子 α が \mathbf{x}' にいる確率は $\rho_\alpha(\mathbf{x}') d^3x'$ なので、電荷密度は $f(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|)$ の $\rho_\alpha(\mathbf{x}') d^3x'$ 倍になる。この陽子が位置 \mathbf{x} に作る電荷密度は、陽子の存在するすべての点 \mathbf{x}' における $f(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) \rho_\alpha(\mathbf{x}') d^3x'$ の和で与えられるから

$$\int f(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) \rho_\alpha(\mathbf{x}') d^3x'$$

となる。原子核全体の電荷密度 $\rho_c(\mathbf{x})$ を求めるには、いろいろな陽子による電荷密度をすべてたし合わせて

$$\rho_c(\mathbf{x}) = \sum_{\substack{\alpha \in A \\ \tau = +1}} \int f(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) \rho_\alpha(\mathbf{x}') d^3x' = \int f(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) \rho_p(\mathbf{x}') d^3x' \quad (3.2)$$

とすればよい。 ρ_p は式 (2.50) の陽子密度である。電荷密度 ρ_c は、陽子密度 ρ_p と陽子の電荷の広がり f の畳み込みになっていることがわかる。畳み込みのフーリエ変換は、それぞれの関数のフーリエ変換の積になるから、(3.2) をフーリエ変換すると

$$\hat{\rho}_c = \hat{f} \hat{\rho}_p \quad (3.3)$$

となる。ただし、記号 $\hat{}$ はフーリエ変換を表す。この式にあらわれる分布関数 f のフーリエ変換

$$F(q) = \hat{f}(q) = \int f(r) e^{-iq \cdot \mathbf{x}} d^3x \quad (3.4)$$

を形状因子という。 f が球対称なので、形状因子は $q = |\mathbf{q}|$ だけの関数である。また、(3.1) より形状因子の性質 $F(0) = 1$ がわかる。

以上の計算は電荷をもつ陽子に対するものであったが、電荷をもたない中性子に対しても同じ計算によって電荷分布の変化が生じる。なぜならば、中性子の全電荷は0であるが電荷分布は存在するので（中心の近くでは正、遠くでは負）、陽子のときと同じ(3.2)のような計算を行うと、0でない電荷分布が得られるからである。したがって、中性子にも陽子と同じような形状因子がある。ただし、中性子の全電荷は0だから、中性子の形状因子に対する規格化条件は $F(0) = 0$ である。

核子のもつ大きな異常磁気モーメントも原子核の電荷分布に影響を与える。古典的には、核子のもつ磁石が原子核の中を動くことによって電場が発生し、その電場によって原子核の電荷分布が変化すると考えられる。このような変化は、核子のまわりの磁気モーメントが大きいところほど大きくなるだろうから、電荷のときと同じように、核子の磁気的な広がりや形状が電荷分布の変化に影響する。そのため、核子の磁気の広がりを記述するもう1つの形状因子を導入すれば、異常磁気モーメントによる電荷分布の変化を記述できそうである。その準備として、まず形状因子が一般にどのような形になるか調べる。

式(3.2)の電荷密度は形状因子を使って表すと

$$\begin{aligned}\rho_c(\mathbf{x}) &= \sum_{\alpha \in A} \int f_\tau(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) \rho_\alpha(\mathbf{x}') d^3x' \\ &= \sum_{\alpha} \int d^3x' \rho_\alpha(\mathbf{x}') \left[\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} F_\tau(q) \right] \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} \left[\sum_{\alpha} \int d^3x' e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}'} \rho_\alpha(\mathbf{x}') F_\tau(q) \right]\end{aligned}$$

となる。ただし、中性子状態も考慮しているので、陽子と中性子を区別するための添え字 τ を形状因子につけてある。核子 α の存在確率密度 ρ_α を波動関数 u_α で表すと、電荷密度は

$$\rho_c(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} \left[\sum_{\alpha} \int d^3x' e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}'} u_\alpha^\dagger(\mathbf{x}') u_\alpha(\mathbf{x}') F_\tau(q) \right] \quad (3.5)$$

または

$$\rho_c(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} \left[\sum_{\alpha} \int d^3x' e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}'} \bar{u}_\alpha(\mathbf{x}') (\gamma^0 F_\tau(q)) u_\alpha(\mathbf{x}') \right] \quad (3.6)$$

という形に書ける。この形にすると、電荷密度 ρ_c を四元電流

$$j^\mu(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} \left[\sum_{\alpha} \int d^3x' e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}'} \bar{u}_\alpha(\mathbf{x}') (\gamma^\mu F_\tau(q)) u_\alpha(\mathbf{x}') \right] \quad (3.7)$$

の時間成分と解釈することができる。また、形状因子が行列であっても何も問題ないことがわかる。よって、(3.7)を一般化した

$$J^\mu(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} \left[\sum_{\alpha} \int d^3x' e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}'} \bar{u}_\alpha(\mathbf{x}') \Gamma_\tau^\mu(\mathbf{q}) u_\alpha(\mathbf{x}') \right] \quad (3.8)$$

を考えると、四元ベクトル $\bar{u}_\alpha \Gamma_\tau^\mu(\mathbf{q}) u_\alpha$ の時間成分に含まれる $\Gamma_\tau^0(\mathbf{q})$ が形状因子として最も一般的なものになる。ただし $\Gamma_\tau^\mu(\mathbf{q})$ は、 $\bar{u}_\alpha \Gamma_\tau^\mu(\mathbf{q}) u_\alpha$ が四元ベクトルになるならば一般にどのようなものでもよい。双線形形式 $\bar{u}_\alpha \Gamma_\tau^\mu(\mathbf{q}) u_\alpha$ が四元ベクトルになる場合、 $\Gamma_\tau^\mu(\mathbf{q})$ の形として考えられる最も一般的なものは

$$\Gamma_\tau^\mu(\mathbf{q}) = \gamma^\mu F_{1\tau}(q) + \sigma^{\mu\nu} q_\nu F_{2\tau}(q) + q^\mu F_{3\tau}(q) \quad (3.9)$$

である [2]。ただし $\sigma^{\mu\nu}$ は

$$\sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{2} [\gamma^\mu, \gamma^\nu] = \frac{i}{2} (\gamma^\mu \gamma^\nu - \gamma^\nu \gamma^\mu) = \begin{cases} 0 & (\mu = \nu) \\ i\gamma^\mu \gamma^\nu & (\mu \neq \nu) \end{cases} \quad (3.10)$$

を表す。式 (3.9) では、 \mathbf{q} が四元ベクトル $q^\mu = (q^0, \mathbf{q})$ になって時間成分 q^0 が入っているが、今考えている慣性系（原子核の中心に原点がある座標系）では q^0 は常に 0 になっているものとし、その 0 を形式的に q^0 と書いて扱う。 $q = |\mathbf{q}| = \sqrt{\mathbf{q}^2 - (q^0)^2}$ の関数 $F_{i\tau}(q)$ はローレンツスカラーである。 $F_{i\tau}(q)$ の関数形は今のところ任意であるが、電流 J^μ に対しては電荷保存則 $\partial_\mu J^\mu = 0$ が成り立つべきだから、これを要請することによって $F_{i\tau}(q)$ に条件がつく。電荷保存則は

$$\begin{aligned} 0 &= \partial_\mu J^\mu(\mathbf{x}) = \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{x}) \\ &= \nabla \cdot \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} \left[\sum_\alpha \int d^3x' e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}'} \bar{u}_\alpha(\mathbf{x}') \boldsymbol{\Gamma}_\tau(\mathbf{q}) u_\alpha(\mathbf{x}') \right] \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} \left[\sum_\alpha \int d^3x' e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}'} i\mathbf{q} \cdot \left(\bar{u}_\alpha(\mathbf{x}') \boldsymbol{\Gamma}_\tau(\mathbf{q}) u_\alpha(\mathbf{x}') \right) \right] \end{aligned} \quad (3.11)$$

$$\begin{aligned} &= -\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} \left[\sum_\alpha \int d^3x' \left(\nabla' e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}'} \right) \cdot \left(\bar{u}_\alpha(\mathbf{x}') \boldsymbol{\Gamma}_\tau(\mathbf{q}) u_\alpha(\mathbf{x}') \right) \right] \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} \left[\sum_\alpha \int d^3x' e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}'} \nabla' \cdot \left(\bar{u}_\alpha(\mathbf{x}') \boldsymbol{\Gamma}_\tau(\mathbf{q}) u_\alpha(\mathbf{x}') \right) \right] \end{aligned} \quad (3.12)$$

である。これに (3.9) を代入する。まず第 1 項目の $\gamma^\mu F_{1\tau}(q)$ を (3.12) に代入した場合を考えると

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} \left[\sum_\alpha \int d^3x' e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}'} \nabla' \cdot \left(\bar{u}_\alpha(\mathbf{x}') \boldsymbol{\gamma} F_{1\tau}(q) u_\alpha(\mathbf{x}') \right) \right] \quad (3.13)$$

となるが、 u_α はディラック方程式の解なので、確率保存則 $\partial_\mu (c\bar{u}_\alpha \gamma^\mu u_\alpha) = \nabla \cdot (c\bar{u}_\alpha \boldsymbol{\gamma} u_\alpha) = 0$ からこの項は 0 になる。次に第 2 項の $\sigma^{\mu\nu} q_\nu F_{2\tau}(q)$ を (3.11) に代入すると

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} \left[\sum_\alpha \int d^3x' e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}'} \sum_{m=1}^3 i q^m \left(\bar{u}_\alpha(\mathbf{x}') \sigma^{\mu\nu} q_\nu F_{2\tau}(q) u_\alpha(\mathbf{x}') \right) \right] \quad (3.14)$$

となる。この式の中の、添え字 m, ν に関する和の部分を実算すると

$$\sum_{m=1}^3 \sigma^{\mu\nu} q_m q_\nu = \sum_{m=1}^3 \sigma^{m0} q_m q_0 + \sum_{m=1}^3 \sum_{n=1}^3 \sigma^{mn} q_m q_n$$

となるが、右辺第 1 項は $q_0 = 0$ により 0 であり、第 2 項も $\sigma^{\mu\nu}$ の添え字に関する反対称性により 0 となる。よって (3.14) も 0 になる。最後に (3.9) の第 3 項、 $q^\mu F_{3\tau}(q)$ を (3.11) に代入すると

$$\begin{aligned} &\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} \left[\sum_\alpha \int d^3x' e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}'} i\mathbf{q} \cdot \left(\bar{u}_\alpha(\mathbf{x}') \mathbf{q} F_{3\tau}(q) u_\alpha(\mathbf{x}') \right) \right] \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} \left[\int d^3x' e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}'} i q^2 \left(F_{3+}(q) \sum_{\alpha \in A_+} \bar{u}_\alpha(\mathbf{x}') u_\alpha(\mathbf{x}') + F_{3-}(q) \sum_{\alpha \in A_-} \bar{u}_\alpha(\mathbf{x}') u_\alpha(\mathbf{x}') \right) \right] \end{aligned} \quad (3.15)$$

となる。ただし、 $F_{3\pm}$ は $F_{3\tau=\pm 1}$ を意味する。また添字集合 A_τ は

$$A_\tau = \{ \alpha \mid \tau_z u_\alpha = \tau u_\alpha \text{ を満たす正エネルギーの占有状態} \} \quad (3.16)$$

である。式 (3.13), (3.14) はすでに 0 になっているから、電荷保存則が成り立つためには (3.15) が単独で恒等的に 0 にならなければならない。したがって

$$F_{3+}(q) = F_{3-}(q) = 0 \quad (3.17)$$

である。これにより (3.9) は

$$\Gamma_\tau^\mu(\mathbf{q}) = \gamma^\mu F_{1\tau}(q) + \sigma^{\mu\nu} q_\nu F_{2\tau}(q) \quad (3.18)$$

となり、その時間成分は

$$\Gamma_\tau^0(\mathbf{q}) = \gamma^0 F_{1\tau}(q) + \gamma^0 \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{q} F_{2\tau}(q) \quad (3.19)$$

という形になる。ただし $-iF_{2\tau}(q)$ を改めて $F_{2\tau}(q)$ とした。式 (3.19) は形状因子として考えられる最も一般的なもので、 $F_{1\tau}(q)$, $F_{2\tau}(q)$ の関数形がわかっているならば電荷密度を

$$\rho_c(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \left[\sum_\alpha \int d^3x' e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}'} u_\alpha^\dagger(\mathbf{x}') F_\tau(\mathbf{q}) u_\alpha(\mathbf{x}') \right] \quad (3.20)$$

$$F_\tau(\mathbf{q}) = F_{1\tau}(q) + \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{q} F_{2\tau}(q) \quad (3.21)$$

と計算できる。

形状因子の最も一般的な形が (3.21) のようになることがわかったので、これを使って異常磁気モーメントを表す形状因子がどのようになるか考える。まず (3.21) の形状因子には、最初に (3.4) で導いた形状因子と同じ形の $F_{1\tau}(q)$ に加えて、 $\boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{q} F_{2\tau}(q)$ という項があることがわかる。この新しい項は γ 行列

$$\boldsymbol{\gamma} = \begin{bmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ -\boldsymbol{\sigma} & 0 \end{bmatrix}$$

を含んでいるから、スピンや磁気モーメントに関係していることが予想される。さらに、 $F_{2\tau}(q)$ が $F_{1\tau}(q)$ と同じ無次元になるように適当に定数を取り出すと、(3.21) は

$$F_\tau(\mathbf{q}) = F_{1\tau}(q) + \frac{\kappa_\tau \hbar}{2Mc} \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{q} F_{2\tau}(q) \quad (3.22)$$

とすることができる。ただし κ_τ は、 $F_{2\tau}(q)$ が $F_{1\tau}(q)$ と同じ規格化条件 $F_{2\tau}(0) = 1$ を満たすようにするための無次元の定数である。このようにして取り出された定数は核磁子

$$\mu_N = \frac{e\hbar}{2Mc} \quad (3.23)$$

になっているので、 $F_{2\tau}(q)$ が異常磁気モーメントを表す形状因子である。($F_{2\tau}(q)$ の前にある定数からは e が消えているが、これは ρ_c の定義を (電荷密度) $\div e$ としたためである。) 念のため $F_{2\tau}(q)$ があっても原子核の全電荷が変わらないことを確かめる。これを確かめるには、(3.20) に (3.22) を代入して全空間で積分すればよい。

$$\begin{aligned} \int \rho_c(\mathbf{x}) d^3x &= \int d^3x \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \left[\sum_\alpha \int d^3x' e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}'} u_\alpha^\dagger(\mathbf{x}') F_\tau(\mathbf{q}) u_\alpha(\mathbf{x}') \right] \\ &= \int d^3q \delta(\mathbf{q}) \left[\sum_\alpha \int d^3x' e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}'} u_\alpha^\dagger(\mathbf{x}') F_\tau(\mathbf{q}) u_\alpha(\mathbf{x}') \right] \\ &= \sum_\alpha \int d^3x' u_\alpha^\dagger(\mathbf{x}') F_\tau(0) u_\alpha(\mathbf{x}') \end{aligned}$$

ここで (3.22) を代入すると、 $F_\tau(0) = F_{1\tau}(0) = \delta_{\tau,+1}$ より

$$\int \rho_c(\mathbf{x}) d^3x = \sum_{\alpha \in A} \delta_{\tau,+1} \int u_\alpha^\dagger(\mathbf{x}') u_\alpha(\mathbf{x}') d^3x' = \sum_{\alpha \in A} \delta_{\tau,+1} = Z \quad (3.24)$$

となる。よって原子核の全電荷は、異常磁気モーメントを含む形状因子 (3.22) を使ったとしても Ze のままである。

実際に計算を行うには $F_{1\tau}(q)$, $F_{2\tau}(q)$ がわかっていなければならないが、これらの関数は散乱実験から決める。実験で直接測定されるのは、核子の空間的な広がりを表す分布関数ではなく、これをフーリエ変換した形状因子である。形状因子は電子散乱の実験などを行い、散乱微分断面積を測定することで知ることができる。核子の形状因子と微分断面積 $d\sigma/d\Omega$ の関係は、次のローゼンブルースの公式 [2, 8] で与えられる。

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left[\frac{G_{E\tau}(q)^2 + b^2 q^2 G_{M\tau}(q)^2}{1 + b^2 q^2} + 2b^2 q^2 G_{M\tau}(q)^2 \tan^2 \frac{\theta}{2} \right] \frac{d\sigma_M}{d\Omega} \quad (3.25)$$

ただし

$$G_{E\tau}(q) = F_{1\tau}(q) - \kappa_\tau b^2 q^2 F_{2\tau}(q) \quad (3.26)$$

$$G_{M\tau}(q) = F_{1\tau}(q) + \kappa_\tau F_{2\tau}(q) \quad (3.27)$$

$$\frac{d\sigma_M}{d\Omega} = \frac{z^2 \alpha^2 c^2 \hbar^2 \cos^2 \frac{\theta}{2}}{4E^2 \sin^4 \frac{\theta}{2} \left(1 + \frac{2E}{Mc^2} \sin^2 \frac{\theta}{2} \right)} \quad (3.28)$$

$$b = \frac{\hbar}{2Mc} \quad (3.29)$$

これらの式で、 E は入射粒子のエネルギー、 M, ze は標的粒子の質量と電荷（標的が陽子の場合は $z = 1$ ）、 α は微細構造定数、 θ は散乱角である（図 4）。また $q = |\mathbf{q}|$ で、 $\hbar\mathbf{q} = \mathbf{p}' - \mathbf{p}$ には移行運動量という物理的意味がある。ただし、散乱の前後で粒子のエネルギーが変化する場合には、 $q = |\mathbf{q}|$ のかわりに

$$q = \sqrt{\mathbf{q}^2 - (q^0)^2}, \quad q^0 = \frac{E'}{c} - \frac{E}{c} \quad (3.30)$$

を使わなければならない。形状因子を実験的に求めるには、まず q をある値に固定していくつかの散乱角で微分断面積を測定する。次に、その測定値をモットの微分断面積 (3.28) で割り、それと $\tan^2(\theta/2)$ の関係をグラフにする。すると、このグラフは直線になるはずだから、傾きから $G_{M\tau}(q)$ の値がわかり、 y 軸との交点

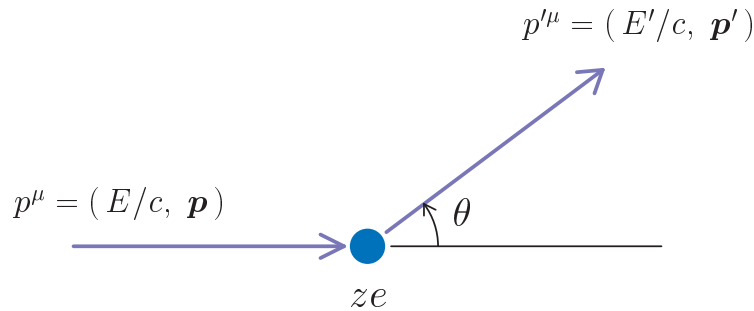


図 4 散乱角

からは $G_{E\tau}(q)$ が求まる。そして、同じ測定をいろいろな q の値に対して行えば、 $G_{E\tau}(q)$, $G_{M\tau}(q)$ の関数形がわかる。この2つの形状因子 $G_{E\tau}(q)$, $G_{M\tau}(q)$ をそれぞれ電気形状因子、磁気形状因子という。これらは $q=0$ でそれぞれ核子の電荷と磁気モーメントの大きさになる。

$$\begin{cases} G_{E+}(0) = 1 \\ G_{E-}(0) = 0 \end{cases} \quad \begin{cases} G_{M+}(0) = 2.793 \\ G_{M-}(0) = -1.913 \end{cases} \quad (3.31)$$

この値と規格化条件 $F_{1+}(0) = F_{2+}(0) = F_{2-}(0) = 1$, $F_{1-}(0) = 0$ を用いると、(3.27) から κ_{τ} の値が

$$\kappa_{+} = 1.793, \quad \kappa_{-} = -1.913 \quad (3.32)$$

と定まる。 κ_{τ} は核子の磁気モーメントの異常な部分の大きさを表す。

陽子の形状因子は、液体水素標的を使った電子散乱の実験で測定できる。実験で測定された陽子の形状因子は、ダイポール適合と呼ばれる次の関数を使ってかなりよく再現できる [8]。

$$\begin{aligned} G_{E+}(q) &= D(q), & G_{M+}(q) &= (1 + \kappa_{+}) D(q) \\ D(q) &= \frac{1}{(1 + a^2 q^2)^2}, & a &= 0.234 \text{ fm} \end{aligned} \quad (3.33)$$

形状因子は、電荷や磁気モーメントの広がりを表す分布関数をフーリエ変換したものだから、 $D(q)$ をフーリエ逆変換すれば陽子の形を知ることができる。 $D(q)$ のフーリエ逆変換は複素積分などを使えば求められ

$$\check{D}(r) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int D(q) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} d^3q = \frac{1}{8\pi a^3} e^{-\frac{r}{a}} \quad (3.34)$$

となる (図 5)。この分布関数を使って陽子の平均二乗半径 r_p を求めると

$$r_p^2 = \int r^2 \left(\frac{1}{8\pi a^3} e^{-\frac{r}{a}} \right) d^3x = \frac{1}{2a^3} \int_0^{\infty} r^4 e^{-\frac{r}{a}} dr = 12a^2 \quad (3.35)$$

となるので、陽子の大きさの目安として $r_p = 0.81 \text{ fm}$ を得る。

中性子の形状因子を散乱実験によって求める場合、中性子標的はないので重陽子を使う。そのため、陽子による散乱の効果を差し引く必要があり、中性子の形状因子は陽子ほど正確には測定できない。陽子の場合に比べ不定性は大きいですが、磁気形状因子については陽子と同じダイポール適合でよく表すことができる。

$$G_{M-}(q) = \kappa_{-} D(q) \quad (3.36)$$

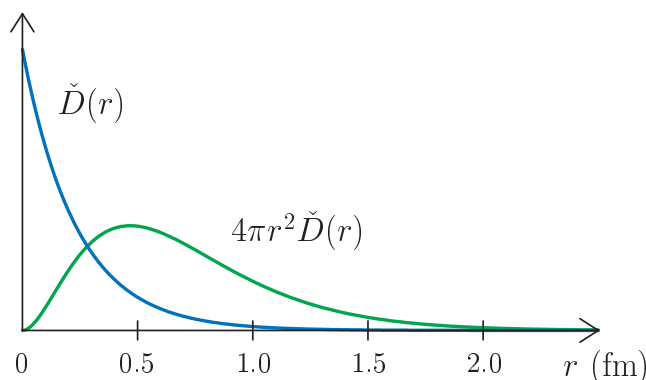


図 5 陽子の形状

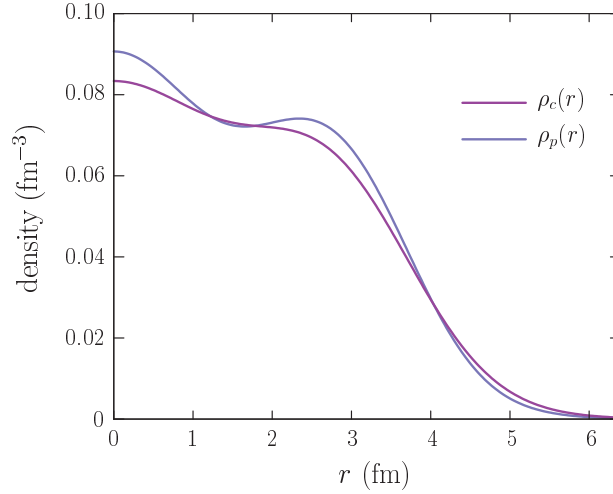


図6 ^{48}Ca の電荷分布

一方、電気形状因子についてはよくわからない部分が多い。0に近い値をもつので $G_{E-}(q) = 0$ としてもよいが、ここでは次の形の関数を使って計算する [9]。

$$G_{E-}(q) = \frac{1}{[1 + (r_+^2/12)q^2]^2} - \frac{1}{[1 + (r_-^2/12)q^2]^2}, \quad r_{\pm}^2 = 0.9^2 \mp 0.06 \text{ fm}^2 \quad (3.37)$$

$G_{E\tau}(q)$, $G_{M\tau}(q)$ の形が決まったので、もとの形状因子 $F_{1\tau}(q)$, $F_{2\tau}(q)$ の関数形も決まる。これらは (3.26), (3.27) から次のようになる。

$$F_{1\tau}(q) = \frac{G_{E\tau}(q) + b^2 q^2 G_{M\tau}(q)}{1 + b^2 q^2} = G_{M\tau}(q) - \frac{G_{M\tau}(q) - G_{E\tau}(q)}{1 + b^2 q^2} \quad (3.38)$$

$$F_{2\tau}(q) = \frac{1}{\kappa_{\tau}} \frac{G_{M\tau}(q) - G_{E\tau}(q)}{1 + b^2 q^2} \quad (3.39)$$

以上の形状因子を用いて計算した電荷分布の例を図6に示す。陽子密度 $\rho_p(r)$ には波のような形があらわれるが、電荷密度 $\rho_c(r)$ ではなめらかになっている。

3.2 電荷分布の計算方法

原子核の電荷分布を数値的に求めるには (3.20) の積分

$$\rho_c(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \left[\sum_{\alpha} \int d^3x' e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}'} u_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}') \left(F_{1\tau}(q) + \kappa_{\tau} b \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\gamma} F_{2\tau}(q) \right) u_{\alpha}(\mathbf{x}') \right] \quad (3.40)$$

を計算すればよい ($b = \hbar/2Mc$)。しかし、この積分は多重積分になっており、しかも波動関数の角度部分に関する積分が含まれているため計算は面倒である。そこで、ダイポール型の関数のフーリエ変換が解析的に求まることを利用して、多重積分の数を減らすことを考える。

式 (3.40) はフーリエ逆変換の形になっているから、角括弧の中は電荷密度 ρ_c のフーリエ変換

$$\hat{\rho}_c(\mathbf{q}) = \sum_{\alpha} \int d^3x e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} u_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}) \left(F_{1\tau}(q) + \kappa_{\tau} b \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\gamma} F_{2\tau}(q) \right) u_{\alpha}(\mathbf{x}) \quad (3.41)$$

である。この式の $F_{1\tau}(q)$ の項だけを考えると

$$\sum_{\alpha} \int d^3x e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} u_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}) F_{1\tau}(q) u_{\alpha}(\mathbf{x}) = \sum_{\tau} \int d^3x e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} F_{1\tau}(q) \rho_{1\tau}(r) \quad (3.42)$$

と書ける。ただし、 $\rho_{1\tau}(r)$ は核子密度

$$\rho_{1\tau}(r) = \begin{cases} \rho_p(r) & \tau = +1 \\ \rho_n(r) & \tau = -1 \end{cases} \quad (3.43)$$

である。中性子密度 $\rho_n(r)$ は、式 (2.47), (2.50) を使って書くと $\rho_n(r) = \rho_b(r) - \rho_p(r)$ となる。式 (3.41) の $F_{2\tau}(q)$ の項も (3.42) と同じ形にすることができる。この項は

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha} \int d^3x e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} u_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}) \left(\kappa_{\tau} b \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\gamma} F_{2\tau}(q) \right) u_{\alpha}(\mathbf{x}) &= \sum_{\alpha} \kappa_{\tau} F_{2\tau}(q) \int d^3x \left(i b \nabla e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \right) \cdot u_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}) \boldsymbol{\gamma} u_{\alpha}(\mathbf{x}) \\ &= \sum_{\alpha} \kappa_{\tau} F_{2\tau}(q) \int d^3x e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \left(-i b \nabla \cdot u_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}) \boldsymbol{\gamma} u_{\alpha}(\mathbf{x}) \right) \\ &= \sum_{\tau n \kappa} \kappa_{\tau} F_{2\tau}(q) \int d^3x e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \left(-i b \nabla \cdot \sum_m u_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}) \boldsymbol{\gamma} u_{\alpha}(\mathbf{x}) \right) \end{aligned} \quad (3.44)$$

となるので、最初に $u_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}) \boldsymbol{\gamma} u_{\alpha}(\mathbf{x})$ を計算する。 $u_{\alpha}(\mathbf{x})$ に中心力の波動関数 (2.42) を代入すると

$$\begin{aligned} u_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}) \boldsymbol{\gamma} u_{\alpha}(\mathbf{x}) &= \begin{bmatrix} \frac{F_{\alpha}(r)}{r} \mathcal{Y}_{\kappa m}^{\dagger} & -i \frac{G_{\alpha}(r)}{r} \mathcal{Y}_{-\kappa m}^{\dagger} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ -\boldsymbol{\sigma} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{F_{\alpha}(r)}{r} \mathcal{Y}_{\kappa m} \\ i \frac{G_{\alpha}(r)}{r} \mathcal{Y}_{-\kappa m} \end{bmatrix} \chi_{\tau}^{\dagger} \chi_{\tau} \\ &= i \frac{F_{\alpha}(r) G_{\alpha}(r)}{r^2} \left(\mathcal{Y}_{\kappa m}^{\dagger} \boldsymbol{\sigma} \mathcal{Y}_{-\kappa m} + \mathcal{Y}_{-\kappa m}^{\dagger} \boldsymbol{\sigma} \mathcal{Y}_{\kappa m} \right) \end{aligned}$$

となる。公式

$$\mathcal{Y}_{-\kappa m} = -\frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{x}}{r} \mathcal{Y}_{\kappa m} \quad (3.45)$$

によって $\mathcal{Y}_{-\kappa m}$ を $\mathcal{Y}_{\kappa m}$ で表すと

$$u_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}) \boldsymbol{\gamma} u_{\alpha}(\mathbf{x}) = -i \frac{F_{\alpha}(r) G_{\alpha}(r)}{r^3} \mathcal{Y}_{\kappa m}^{\dagger} \{ \boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{x} \} \mathcal{Y}_{\kappa m}$$

となるが、反交換関係 $\{ \sigma_i, \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{x} \}$ は

$$\{ \sigma_i, \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{x} \} = \sum_{j=1}^3 \{ \sigma_i, \sigma_j \} x^j = \sum_{j=1}^3 2\delta_{ij} x^j = 2x^i \quad (3.46)$$

であるから

$$u_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}) \boldsymbol{\gamma} u_{\alpha}(\mathbf{x}) = -2i \left(F_{\alpha}(r) G_{\alpha}(r) \frac{\mathbf{x}}{r^3} \right) \mathcal{Y}_{\kappa m}^{\dagger} \mathcal{Y}_{\kappa m} \quad (3.47)$$

を得る。式 (2.46) を使うと、この式の m についての和が計算できる。

$$\sum_{m=-j}^j u_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}) \boldsymbol{\gamma} u_{\alpha}(\mathbf{x}) = -2i \frac{2j+1}{4\pi} \left(F_{\alpha}(r) G_{\alpha}(r) \frac{\mathbf{x}}{r^3} \right) \quad (3.48)$$

そして、これを微分したものは

$$-ib \nabla \cdot \sum_m u_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \boldsymbol{\gamma} u_\alpha(\mathbf{x}) = -2b \frac{2j+1}{4\pi} \left[\left(\nabla F_\alpha(r) G_\alpha(r) \right) \cdot \frac{\mathbf{x}}{r^3} + F_\alpha(r) G_\alpha(r) \left(\nabla \cdot \frac{\mathbf{x}}{r^3} \right) \right]$$

となる。この式の第2項は

$$F_\alpha(r) G_\alpha(r) \left(\nabla \cdot \frac{\mathbf{x}}{r^3} \right) = F_\alpha(r) G_\alpha(r) \left(-\nabla^2 \frac{1}{r} \right) = F_\alpha(r) G_\alpha(r) \cdot 4\pi \delta(\mathbf{x})$$

であるが、式 (2.78), (2.79) より $F_\alpha(0) = G_\alpha(0) = 0$ になるから、この項は考えなくてよい。よって

$$\begin{aligned} -ib \nabla \cdot \sum_m u_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \boldsymbol{\gamma} u_\alpha(\mathbf{x}) &= -2b \frac{2j+1}{4\pi r^2} \frac{d}{dr} F_\alpha(r) G_\alpha(r) \\ &= -2b \frac{2j+1}{4\pi r^2} \left[F_\alpha(r) \frac{d}{dr} G_\alpha(r) + G_\alpha(r) \frac{d}{dr} F_\alpha(r) \right] \end{aligned} \quad (3.49)$$

となる。 F_α, G_α の導関数は、動径方向のディラック方程式 (2.51), (2.52) を使って消すことができる。

$$\begin{aligned} &-ib \nabla \cdot \sum_m u_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \boldsymbol{\gamma} u_\alpha(\mathbf{x}) \\ &= -2b \frac{2j+1}{4\pi r^2} \left[F_\alpha(r) \left(\frac{\kappa}{r} G_\alpha(r) + \frac{Mc^2 - V_s(r) - E_\alpha + V_0(r)}{c\hbar} F_\alpha(r) \right) \right. \\ &\quad \left. + G_\alpha(r) \left(-\frac{\kappa}{r} F_\alpha(r) + \frac{Mc^2 - V_s(r) + E_\alpha - V_0(r)}{c\hbar} G_\alpha(r) \right) \right] \\ &= -\frac{2j+1}{4\pi r^2} \left[\frac{Mc^2 - V_s(r) - E_\alpha + V_0(r)}{Mc^2} F_\alpha(r)^2 + \frac{Mc^2 - V_s(r) + E_\alpha - V_0(r)}{Mc^2} G_\alpha(r)^2 \right] \end{aligned} \quad (3.50)$$

ここで密度関数 $\rho_{2\tau}(r)$ を

$$\begin{aligned} \rho_{2\tau}(r) &= \kappa_\tau \sum_{\alpha \in A_\tau} \left(-ib \nabla \cdot u_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \boldsymbol{\gamma} u_\alpha(\mathbf{x}) \right) \\ &= -\kappa_\tau \sum_{\alpha \in A_\tau} \frac{2j+1}{4\pi r^2} \left[\frac{Mc^2 - V_s(r) - E_\alpha + V_0(r)}{Mc^2} F_\alpha(r)^2 + \frac{Mc^2 - V_s(r) + E_\alpha - V_0(r)}{Mc^2} G_\alpha(r)^2 \right] \end{aligned} \quad (3.51)$$

と定義する。これを (3.44) に代入すると

$$\sum_\alpha \int d^3x e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} u_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \left(\kappa_\tau b \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\gamma} F_{2\tau}(q) \right) u_\alpha(\mathbf{x}) = \sum_\tau \int d^3x e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} F_{2\tau}(q) \rho_{2\tau}(r) \quad (3.52)$$

となるので、この式と (3.42) より、電荷密度のフーリエ変換 (3.41) は

$$\hat{\rho}_c(q) = \sum_\tau \int d^3x e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \left(F_{1\tau}(q) \rho_{1\tau}(r) + F_{2\tau}(q) \rho_{2\tau}(r) \right) \quad (3.53)$$

という形に書ける。

電荷密度 $\rho_c(r)$ を求めるには、 $\hat{\rho}_c(q)$ をフーリエ逆変換すればよい。

$$\begin{aligned} \rho_c(r) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \left[\sum_\tau \int d^3x' e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}'} \left(F_{1\tau}(q) \rho_{1\tau}(r') + F_{2\tau}(q) \rho_{2\tau}(r') \right) \right] \\ &= \sum_\tau \int d^3x' \left(\check{F}_{1\tau}(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) \rho_{1\tau}(r') + \check{F}_{2\tau}(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) \rho_{2\tau}(r') \right) \end{aligned} \quad (3.54)$$

ただし、 $\check{F}_{i\tau}$ ($i = 1, 2$) はフーリエ逆変換

$$\check{F}_{i\tau}(r) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int F_{i\tau}(q) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} d^3q \quad (3.55)$$

である。式 (3.54) の角度積分を計算する。この積分は

$$\int d^3x' \check{F}_{i\tau}(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) \rho_{i\tau}(r') = 2\pi \int_0^\infty r'^2 dr' \int_{-1}^1 dt \check{F}_{i\tau}(\sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr't}) \rho_{i\tau}(r')$$

であるが、変数変換 $s = \sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr't}$ を行うと

$$\begin{aligned} \int d^3x' \check{F}_{i\tau}(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) \rho_{i\tau}(r') &= 2\pi \int_0^\infty dr' r'^2 \rho_{i\tau}(r') \int_{r+r'}^{|r-r'|} \left(-\frac{s}{rr'} ds\right) \check{F}_{i\tau}(s) \\ &= \frac{2\pi}{r} \int_0^\infty dr' r' \rho_{i\tau}(r') \int_{|r-r'|}^{r+r'} ds s \check{F}_{i\tau}(s) \end{aligned} \quad (3.56)$$

となる。フーリエ逆変換 (3.55) は

$$\begin{aligned} \check{F}_{i\tau}(s) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int F_{i\tau}(q) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{s}} d^3q = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty q^2 dq F_{i\tau}(q) \int_{-1}^1 dt e^{iqst} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2 is} \left[\int_0^\infty dq q F_{i\tau}(q) e^{iqs} - \int_0^\infty dq q F_{i\tau}(q) e^{-iqs} \right] \end{aligned}$$

と表せるが、形状因子 $G_{E\tau}(q)$, $G_{M\tau}(q)$ にはすべてダイポール型のものを使っているので、(3.38), (3.39) より $F_{i\tau}(-q) = F_{i\tau}(q)$ である。したがって、2つ目の積分で変数変換 $q \rightarrow -q$ を行うと

$$\begin{aligned} \check{F}_{i\tau}(s) &= \frac{1}{(2\pi)^2 is} \int_{-\infty}^\infty dq q F_{i\tau}(q) e^{iqs} \\ &= -\frac{1}{(2\pi)^2 s} \int_{-\infty}^\infty dq F_{i\tau}(q) \frac{d}{ds} e^{iqs} \\ &= -\frac{1}{2\pi s} \frac{d}{ds} \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty dq F_{i\tau}(q) e^{iqs} \right] = -\frac{1}{2\pi s} \frac{d}{ds} f_{i\tau}(s) \end{aligned} \quad (3.57)$$

となる。ただし $f_{i\tau}$ は、 $F_{i\tau}$ の1次元のフーリエ逆変換

$$f_{i\tau}(r) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty F_{i\tau}(q) e^{iqr} dq \quad (i = 1, 2) \quad (3.58)$$

である。よって、(3.57) を (3.56) に代入すれば

$$\begin{aligned} \int d^3x' \check{F}_{i\tau}(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) \rho_{i\tau}(r') &= -\frac{1}{r} \int_0^\infty dr' r' \rho_{i\tau}(r') \int_{|r-r'|}^{r+r'} ds \frac{d}{ds} f_{i\tau}(s) \\ &= \frac{1}{r} \int_0^\infty dr' r' \left(f_{i\tau}(|r-r'|) - f_{i\tau}(r+r') \right) \rho_{i\tau}(r') \end{aligned} \quad (3.59)$$

となる。これより、(3.54) の電荷密度は

$$\rho_c(r) = \sum_\tau \frac{1}{r} \int_0^\infty dr' r' \left[\left(f_{1\tau}(|r-r'|) - f_{1\tau}(r+r') \right) \rho_{1\tau}(r') + \left(f_{2\tau}(|r-r'|) - f_{2\tau}(r+r') \right) \rho_{2\tau}(r') \right] \quad (3.60)$$

という積分になる。これは1次元の積分だから、 $f_{i\tau}$ が求まれば数値計算は簡単である。

形状因子の 1 次元のフーリエ逆変換 $f_{i\tau}$ ($i = 1, 2$) は解析的に求められる。計算には次の積分を使う。

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{iqr}}{(1+a^2q^2)^2} dq = \frac{1}{4a} \left(1 + \frac{r}{a}\right) e^{-\frac{r}{a}} \quad (3.61)$$

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{iqr}}{(1+a^2q^2)^2(1+b^2q^2)} dq = \frac{a}{4(a^2-b^2)} \left[\left(1 - \frac{2b^2}{a^2-b^2} + \frac{r}{a}\right) e^{-\frac{r}{a}} + \frac{2b^3}{a(a^2-b^2)} e^{-\frac{r}{b}} \right] \quad (3.62)$$

これらの積分には留数定理が使えるので、右辺の式は代数的な計算で導くことができる。

4 電子散乱

理論的に求めた原子核の電荷分布を用いて、電子-原子核弾性散乱の微分断面積を計算する。電子を標的の原子に向けて飛ばし、散乱させることを考えると、入射電子の運動エネルギーが比較的小さい場合には軌道電子による散乱の断面積が大きい。しかし、入射電子のエネルギーが大きくなっていくとこの断面積は急速に小さくなり、かわりに電子-原子核散乱が重要になってくる。そして、入射電子のド・ブROI波長が原子核の大きさよりも小さくなると、散乱断面積に原子核の電荷分布の特徴が現れる。このようなエネルギー領域 ($E \gtrsim 100 mc^2$) では、移行運動量の小さい前方散乱 ($\theta \lesssim 1^\circ$) を除いて軌道電子の影響は無視できるので [10]、電子-原子核散乱の実験を行うことできれいに原子核の電荷分布を調べられる。

原子核の電荷分布 ρ_c が球対称であるとする、原子核の中心から距離 r だけ離れた点における電子のポテンシャルエネルギーは次で与えられる。

$$V(r) = \int \frac{1}{4\pi} \frac{-e^2 \rho_c(r')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} d^3x' = -\alpha c \hbar \int \frac{\rho_c(r')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} d^3x' \quad (4.1)$$

ここで $\alpha = e^2/4\pi c \hbar$ は微細構造定数である。角度積分を実行すると

$$\begin{aligned} \int \frac{\rho_c(r')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} d^3x' &= 2\pi \int_0^\infty r'^2 dr' \int_{-1}^1 dt \frac{\rho_c(r')}{\sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr't}} \\ &= 2\pi \int_0^\infty dr' r'^2 \rho_c(r') \frac{(r+r') - |r-r'|}{rr'} \end{aligned}$$

となるが

$$(r+r') - |r-r'| = \begin{cases} 2r' & (r' < r) \\ 2r & (r' > r) \end{cases}$$

であるから

$$V(r) = -4\pi\alpha c \hbar \left[\frac{1}{r} \int_0^r r'^2 \rho_c(r') dr' + \int_r^\infty r' \rho_c(r') dr' \right] \quad (4.2)$$

となる。 r が大きいところでは $\rho_c(r) \simeq 0$ だから $V(r)$ はクーロンポテンシャルと同じになる (図 7)。以下では、ポテンシャル $V(r)$ による電子の弾性散乱をディラック方程式を使って調べる。弾性散乱では散乱の前

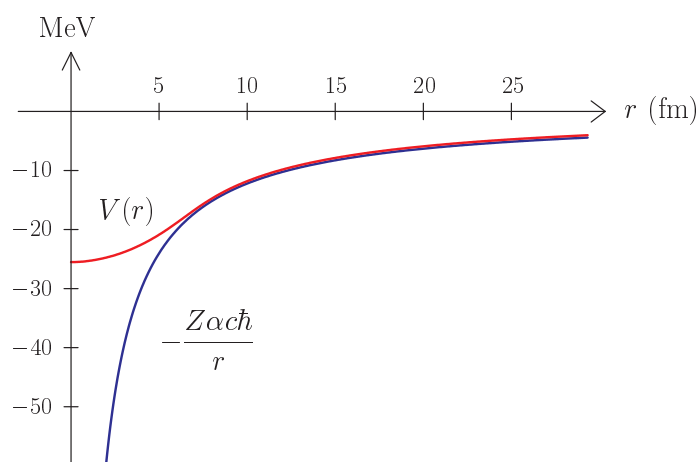


図 7 ^{208}Pb の電荷による電子のポテンシャル

後で電子のエネルギーが変化しないから、エネルギーが一定となる静的なディラック方程式で電子の状態を記述できる。実際の散乱では、電子と原子核の磁気モーメントによる磁気的な相互作用もあるが、これから考えるエネルギー領域ではこの効果は重要でないため無視できる [11]。また、輻射補正のような量子電磁力学的な効果による微分断面積の変化も小さいので無視する。

4.1 クーロン散乱の部分波

まず最初に (4.2) の $V(r)$ でなく、点電荷のクーロンポテンシャル

$$V_0(r) = \frac{Q\alpha\hbar}{r} \quad (4.3)$$

による荷電粒子の散乱を考える。ここで Q は、入射粒子と標的粒子の電荷の積を e^2 で割ったものを表し、例えば電荷 Ze の点粒子と電子の散乱では $Q = -Z$ になる。クーロンポテンシャル (4.3) は球対称なので、ディラック方程式の解で角運動量の固有状態にもなっているものがある。この場合の散乱粒子の 4 成分スピノールを

$$\begin{bmatrix} \frac{f_\kappa(r)}{r} \mathcal{Y}_{\kappa m}(\hat{\mathbf{x}}) \\ i \frac{g_\kappa(r)}{r} \mathcal{Y}_{-\kappa m}(\hat{\mathbf{x}}) \end{bmatrix} \quad (4.4)$$

と置くと、 $f_\kappa(r)$, $g_\kappa(r)$ は、式 (2.39), (2.40) で与えられる動径方向のディラック方程式

$$\frac{d}{dr} f_\kappa(r) = -\frac{\kappa}{r} f_\kappa(r) + \frac{mc^2 + E - V_0(r)}{c\hbar} g_\kappa(r) \quad (4.5)$$

$$\frac{d}{dr} g_\kappa(r) = \frac{\kappa}{r} g_\kappa(r) + \frac{mc^2 - E + V_0(r)}{c\hbar} f_\kappa(r) \quad (4.6)$$

を満足する。ここでは粒子が無遠慮に飛んでいく散乱状態を考えるので、粒子のエネルギーは静止質量よりも大きく $E > mc^2$ である。

これを解くために、まず $r \rightarrow 0$ の場合の解の漸近形を求める。 $r \rightarrow 0$ のとき微分方程式は

$$\left(\frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r} \right) f_\kappa(r) = -\frac{Q\alpha}{r} g_\kappa(r), \quad \left(\frac{d}{dr} - \frac{\kappa}{r} \right) g_\kappa(r) = \frac{Q\alpha}{r} f_\kappa(r) \quad (4.7)$$

となるが、これに解の漸近形 $f_\kappa(r) = Ar^\lambda$, $g_\kappa(r) = Br^{\lambda'}$ を代入すると

$$(\lambda + \kappa) Ar^{\lambda-1} = -Q\alpha Br^{\lambda'-1}, \quad (\lambda' - \kappa) Br^{\lambda'-1} = Q\alpha Ar^{\lambda-1}$$

となる。この等式が $A = B = 0$ 以外の形で成り立つためには $\lambda = \lambda'$ である。このとき

$$(\lambda + \kappa) A = -Q\alpha B, \quad (\lambda - \kappa) B = Q\alpha A$$

となるので、この 2 つの式から A, B を消去すると λ が決まる。

$$\lambda^2 = \kappa^2 - Q^2\alpha^2, \quad \lambda = \pm\sqrt{\kappa^2 - Q^2\alpha^2} \quad (4.8)$$

あとで必要になる $Q = -Z$ の場合には、 $|Q\alpha| = Z\alpha \approx Z/137 < 1$ であり、 $|\kappa| \geq 1$ だから λ は実数である。また、原点で有界な解に対しては $\lambda = \sqrt{\kappa^2 - Z^2\alpha^2} > 0$ となる。以下では $\lambda > 0$ とする。この λ を使うと $r \rightarrow 0$ の漸近形は次のように書ける。

$$f_\kappa(r) = Ar^\lambda, \quad g_\kappa(r) = -\frac{\lambda + \kappa}{Q\alpha} Ar^\lambda \quad (4.9)$$

次に $r \rightarrow \infty$ のときの漸近形を求める。 $r \rightarrow \infty$ のとき、動径方向の微分方程式は

$$\frac{d}{dr} f_{\kappa}(r) = \frac{E + mc^2}{c\hbar} g_{\kappa}(r), \quad \frac{d}{dr} g_{\kappa}(r) = -\frac{E - mc^2}{c\hbar} f_{\kappa}(r) \quad (4.10)$$

という形になる。 $g_{\kappa}(r)$ を消去すると

$$\frac{d^2}{dr^2} f_{\kappa}(r) = -\frac{E^2 - m^2 c^4}{c^2 \hbar^2} f_{\kappa}(r) \quad (4.11)$$

となるので、 $f_{\kappa}(r) = C e^{ikr} + D e^{-ikr}$ が遠方における漸近形である。ただし k は

$$k = \frac{\sqrt{E^2 - m^2 c^4}}{c\hbar}, \quad (c\hbar k)^2 = (E + mc^2)(E - mc^2) \quad (4.12)$$

である。外側に広がっていく波を考えることにすると、 $r \rightarrow \infty$ での漸近形は $f_{\kappa}(r) = e^{ikr}$ になる。これを (4.10) に代入すると $g_{\kappa}(r)$ の漸近形も決まり

$$f_{\kappa}(r) = e^{ikr}, \quad g_{\kappa}(r) = i \frac{c\hbar k}{E + mc^2} e^{ikr} \quad (4.13)$$

となる。

以上の漸近形を利用してディラック方程式を解く。まず、ディラック方程式 (4.5), (4.6) を k で割り、無次元の変数 $\rho = kr$ を使って次の形にする。

$$\frac{df_{\kappa}}{d\rho} + \frac{\kappa}{\rho} f_{\kappa} = -\frac{Q\alpha}{\rho} g_{\kappa} + \frac{E + mc^2}{c\hbar k} g_{\kappa}, \quad \frac{dg_{\kappa}}{d\rho} - \frac{\kappa}{\rho} g_{\kappa} = \frac{Q\alpha}{\rho} f_{\kappa} - \frac{E - mc^2}{c\hbar k} f_{\kappa} \quad (4.14)$$

そして f_{κ}, g_{κ} から上で求めた漸近形を取り出して

$$f_{\kappa} = \rho^{\lambda} e^{i\rho} y_1, \quad g_{\kappa} = i \frac{c\hbar k}{E + mc^2} \rho^{\lambda} e^{i\rho} y_2 \quad (4.15)$$

とする。 f_{κ}, g_{κ} を ρ で微分したものは

$$\frac{df_{\kappa}}{d\rho} = \rho^{\lambda} e^{i\rho} \left(\frac{dy_1}{d\rho} + \frac{\lambda}{\rho} y_1 + i y_1 \right), \quad \frac{dg_{\kappa}}{d\rho} = i \frac{c\hbar k}{E + mc^2} \rho^{\lambda} e^{i\rho} \left(\frac{dy_2}{d\rho} + \frac{\lambda}{\rho} y_2 + i y_2 \right)$$

となるから、これらを (4.14) に代入すると

$$\begin{aligned} \frac{dy_1}{d\rho} + \frac{\lambda + \kappa}{\rho} y_1 + i y_1 &= -i \frac{c\hbar k}{E + mc^2} \frac{Q\alpha}{\rho} y_2 + i y_2 \\ i \frac{c\hbar k}{E + mc^2} \left(\frac{dy_2}{d\rho} + \frac{\lambda - \kappa}{\rho} y_2 + i y_2 \right) &= \frac{Q\alpha}{\rho} y_1 - \frac{E - mc^2}{c\hbar k} y_1 \end{aligned} \quad (4.16)$$

となる。式 (4.12) より

$$\frac{c\hbar k}{E + mc^2} = \frac{E - mc^2}{c\hbar k} = \sqrt{\frac{E - mc^2}{E + mc^2}}$$

であるから、これを使って (4.16) を整理すると

$$\begin{aligned} \rho \frac{dy_1}{d\rho} + (\lambda + \kappa) y_1 + i\rho y_1 &= -i(\nu - \mu) y_2 + i\rho y_2 \\ \rho \frac{dy_2}{d\rho} + (\lambda - \kappa) y_2 + i\rho y_2 &= -i(\nu + \mu) y_1 + i\rho y_1 \end{aligned} \quad (4.17)$$

となる。ただし、定数 μ, ν は

$$\mu = \frac{Q\alpha mc^2}{\hbar k}, \quad \nu = \frac{Q\alpha E}{\hbar k} \quad (4.18)$$

である。これらの定数は次の等式を満足する。

$$\nu^2 - \mu^2 = Q^2\alpha^2 = \kappa^2 - \lambda^2, \quad \kappa^2 + \mu^2 = \lambda^2 + \nu^2 \quad (4.19)$$

微分方程式 (4.17) を解くために、2 つの微分方程式の和と差を作る。 w_1, w_2 を

$$w_1 = y_1 + y_2, \quad w_2 = y_1 - y_2 \quad (4.20)$$

と定義すると、(4.17) の 2 つの微分方程式の和と差は

$$\begin{aligned} \rho \frac{dw_1}{d\rho} + \lambda w_1 + \kappa w_2 + i\rho w_1 &= -i\nu w_1 - i\mu w_2 + i\rho w_1 \\ \rho \frac{dw_2}{d\rho} + \lambda w_2 + \kappa w_1 + i\rho w_2 &= i\nu w_2 + i\mu w_1 - i\rho w_2 \end{aligned}$$

となるので、これを整理して

$$\left[\rho \frac{d}{d\rho} + (\lambda + i\nu) \right] w_1 = -(\kappa + i\mu) w_2 \quad (4.21)$$

$$\left[\rho \frac{d}{d\rho} + (\lambda - i\nu) + 2i\rho \right] w_2 = -(\kappa - i\mu) w_1 \quad (4.22)$$

を得る。この 2 つの微分方程式から w_1 または w_2 についての微分方程式を求めるのは簡単である。まず w_1 についての微分方程式を得るには、(4.21) の両辺に、(4.22) の w_2 にかかっている演算子を作用させて

$$\left[\rho \frac{d}{d\rho} + (\lambda - i\nu) + 2i\rho \right] \left[\rho \frac{d}{d\rho} + (\lambda + i\nu) \right] w_1 = (\kappa + i\mu)(\kappa - i\mu) w_1$$

とする。関係式 (4.19) を使ってこれを計算すると、最終的に

$$\left[\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + (2\lambda + 1 + 2i\rho) \frac{d}{d\rho} + 2i(\lambda + i\nu) \right] w_1 = 0 \quad (4.23)$$

という微分方程式が得られる。 w_2 についても同様で、結果は

$$\left[\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + (2\lambda + 1 + 2i\rho) \frac{d}{d\rho} + 2i(\lambda + 1 + i\nu) \right] w_2 = 0 \quad (4.24)$$

となる。最後に変数変換 $z = -2i\rho$ を行うと、2 つの微分方程式は

$$\left[z \frac{d^2}{dz^2} + (2\lambda + 1 - z) \frac{d}{dz} - (\lambda + i\nu) \right] w_1 = 0 \quad (4.25)$$

$$\left[z \frac{d^2}{dz^2} + (2\lambda + 1 - z) \frac{d}{dz} - (\lambda + 1 + i\nu) \right] w_2 = 0 \quad (4.26)$$

となる。これらは合流型超幾何微分方程式

$$\left[z \frac{d^2}{dz^2} + (b - z) \frac{d}{dz} - a \right] w = 0 \quad (4.27)$$

である。 b が整数でないとき、合流型超幾何微分方程式 (4.27) の一般解は、合流型超幾何関数 $F(a, b, z)$ を使って次のように表せる [12]。

$$w = AF(a, b, z) + Bz^{-b+1}F(a - b + 1, -b + 2, z) \quad (4.28)$$

ただし

$$F(a, b, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n z^n}{(b)_n n!}, \quad (a)_n = \frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(a)} = \begin{cases} 1 & (n=0) \\ a(a+1)\cdots(a+n-1) & (n \geq 1) \end{cases} \quad (4.29)$$

これより、微分方程式 (4.25), (4.26) の一般解はそれぞれ

$$w_1 = AF(\lambda + i\nu, 2\lambda + 1, z) + Bz^{-2\lambda}F(-\lambda + i\nu, -2\lambda + 1, z) \quad (4.30)$$

$$w_2 = CF(\lambda + 1 + i\nu, 2\lambda + 1, z) + Dz^{-2\lambda}F(-\lambda + 1 + i\nu, -2\lambda + 1, z) \quad (4.31)$$

となる。この解のべき関数 $z^{-2\lambda}$ は、 λ が整数でないため多価関数である。そのため、分枝の選び方によって解が変わってしまうように見えるが、分枝の選び方のちがいは定数倍の因子を出すだけなので、定数 B, D があることを考慮すると、どの分枝を選んでも同じである。ただし、波動関数は一価なので、 z の偏角を任意の 1 つに定めなければならない。以下では、1 つに定まった z の偏角を $\text{Arg } z$ という記号で表す。

求まった解には 4 つの定数 A, B, C, D が含まれているが、もとのディラック方程式は 2 つの 1 階微分方程式だから、一般解の任意定数の数は 2 つだけである。そのため、4 つの定数のうち独立なものは 2 つだけで、残りの 2 つはほかの量を使って表すことができる。この 4 つの定数の間に成り立つ関係式は微分方程式 (4.21) または (4.22) から得られる。(4.21) や (4.22) は w_1 と w_2 を関係づける式だから、(4.30), (4.31) より $F(a, b, z)$ と $F(a + 1, b, z)$ の関係を知る必要がある。式 (4.29) より

$$(a + 1)_n = \frac{\Gamma(a + 1 + n)}{\Gamma(a + 1)} = \frac{(a + n)\Gamma(a + n)}{a\Gamma(a)} = \left(1 + \frac{n}{a}\right)(a)_n$$

であるから、これを使うと

$$\begin{aligned} F(a + 1, b, z) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a + 1)_n z^n}{(b)_n n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n z^n}{(b)_n n!} + \frac{z}{a} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n n z^{n-1}}{(b)_n n!} \\ &= F(a, b, z) + \frac{z}{a} \frac{d}{dz} F(a, b, z) \end{aligned}$$

となる。したがって、 $F(a, b, z)$ と $F(a + 1, b, z)$ の関係式

$$\left[z \frac{d}{dz} + a \right] F(a, b, z) = aF(a + 1, b, z) \quad (4.32)$$

が得られる。この関係式を使うと

$$\begin{aligned} &\left[z \frac{d}{dz} + (a - b + 1) \right] z^{-b+1} F(a - b + 1, -b + 2, z) \\ &= z^{-b+1} \left[z \frac{d}{dz} + (a - b + 1) \right] F(a - b + 1, -b + 2, z) + F(a - b + 1, -b + 2, z) \left[z \frac{d}{dz} z^{-b+1} \right] \\ &= (a - b + 1) z^{-b+1} F(a - b + 2, -b + 2, z) + (-b + 1) z^{-b+1} F(a - b + 1, -b + 2, z) \end{aligned}$$

という式が成り立つことがわかる。よって、(4.32) に似た関係式

$$\left[z \frac{d}{dz} + a \right] z^{-b+1} F(a - b + 1, -b + 2, z) = (a - b + 1) z^{-b+1} F(a - b + 2, -b + 2, z) \quad (4.33)$$

も成り立つ。式 (4.30), (4.31) の w_1, w_2 を (4.21) に代入して、今求めた 2 つの関係式を使うと

$$\begin{aligned} & (\lambda + i\nu) AF(\lambda + 1 + i\nu, 2\lambda + 1, z) + (-\lambda + i\nu) Bz^{-2\lambda} F(-\lambda + 1 + i\nu, -2\lambda + 1, z) \\ &= -(\kappa + i\mu) CF(\lambda + 1 + i\nu, 2\lambda + 1, z) - (\kappa + i\mu) Dz^{-2\lambda} F(-\lambda + 1 + i\nu, -2\lambda + 1, z) \end{aligned} \quad (4.34)$$

となる。合流型超幾何微分方程式の 2 つの解 $F(a, b, z)$ と $z^{-b+1}F(a - b + 1, -b + 2, z)$ が線形独立であることを考慮すると、これが恒等式として成り立つためには

$$C = -\frac{\lambda + i\nu}{\kappa + i\mu} A, \quad D = -\frac{-\lambda + i\nu}{\kappa + i\mu} B \quad (4.35)$$

でなければならない。

定数の値が決まったので、 w_1, w_2 からもとの波動関数 f_κ, g_κ も簡単に求められるが、その前に式を見やすくするために w_1, w_2 を少し変形する。変形には合流型超幾何関数のクンマーの変換

$$F(a, b, z) = e^z F(-a + b, b, -z) \quad (4.36)$$

を使う。この等式は、 $e^z f(z)$ という形の関数に対して次のような演算を行うと示せる。

$$\begin{aligned} \left[z \frac{d^2}{dz^2} + (b - z) \frac{d}{dz} - a \right] e^z f(z) &= e^z \left[z \left(\frac{d^2}{dz^2} + 2 \frac{d}{dz} + 1 \right) + (b - z) \left(\frac{d}{dz} + 1 \right) - a \right] f(z) \\ &= e^z \left[z \frac{d^2}{dz^2} + (b + z) \frac{d}{dz} + (-a + b) \right] f(z) \\ &= -e^z \left[(-z) \frac{d^2}{d(-z)^2} + (b - (-z)) \frac{d}{d(-z)} - (-a + b) \right] f(z) \end{aligned}$$

これより $f(z) = F(-a + b, b, -z)$ ととれば、 $e^z f(z)$ は合流型超幾何微分方程式 (4.27) の解になる。したがって、この解は $F(a, b, z)$ と $z^{-b+1}F(a - b + 1, -b + 2, z)$ の線形結合として表せるはずであるが、 $z = 0$ での値を比べると、その表し方は $e^z F(-a + b, b, -z) = F(a, b, z)$ になる。

クンマーの変換を w_2 に対して行うと

$$\begin{aligned} w_1 &= AF(\lambda + i\nu, 2\lambda + 1, z) + Bz^{-2\lambda} F(-\lambda + i\nu, -2\lambda + 1, z) \\ w_2 &= Ce^z F(\lambda - i\nu, 2\lambda + 1, -z) + Dz^{-2\lambda} e^z F(-\lambda - i\nu, -2\lambda + 1, -z) \end{aligned}$$

となる。これらは、(4.19) を考慮して 2 つの偏角 $-2\zeta, -2\tilde{\zeta}$ を

$$e^{-2i\zeta} = \frac{\lambda + i\nu}{\kappa + i\mu}, \quad e^{-2i\tilde{\zeta}} = \frac{-\lambda + i\nu}{\kappa + i\mu} \quad (4.37)$$

と置き、 $z = -2i\rho = -2ikr$ を使うと

$$\begin{aligned} w_1 &= AF(\lambda + i\nu, 2\lambda + 1, -2i\rho) + Bz^{-2\lambda} F(-\lambda + i\nu, -2\lambda + 1, -2i\rho) \\ w_2 &= -Ae^{-2i(\rho+\zeta)} [F(\lambda + i\nu, 2\lambda + 1, -2i\rho)]^* - Bz^{-2\lambda} e^{-2i(\rho+\tilde{\zeta})} [F(-\lambda + i\nu, -2\lambda + 1, -2i\rho)]^* \end{aligned}$$

と表せる。べき関数 $z^{-2\lambda}$ は

$$\begin{aligned} z^{-2\lambda} &= e^{-2\lambda \text{Log } z} = e^{-2\lambda(\ln|z| + i \text{Arg } z)} = e^{-2i\lambda \text{Arg } z} e^{-2\lambda \ln 2\rho} \\ &= e^{-2i\lambda \text{Arg } z} (2\rho)^{-2\lambda} \end{aligned}$$

であるから、 $2^{-2\lambda}e^{-2i\lambda \text{Arg } z}B$ を改めて B とおくと ($\text{Arg } z$ は定数)、 w_1, w_2 は

$$w_1 = AF(\lambda + i\nu, 2\lambda + 1, -2i\rho) + B\rho^{-2\lambda}F(-\lambda + i\nu, -2\lambda + 1, -2i\rho) \quad (4.38)$$

$$w_2 = -Ae^{-2i(\rho+\zeta)}[F(\lambda + i\nu, 2\lambda + 1, -2i\rho)]^* - B\rho^{-2\lambda}e^{-2i(\rho+\tilde{\zeta})}[F(-\lambda + i\nu, -2\lambda + 1, -2i\rho)]^* \quad (4.39)$$

となる。 w_1, w_2 と f_κ, g_κ の関係を (4.15), (4.20) から計算すると

$$f_\kappa = \frac{1}{2}\rho^\lambda e^{i\rho}(w_1 + w_2), \quad g_\kappa = \frac{i}{2}\frac{c\hbar k}{E + mc^2}\rho^\lambda e^{i\rho}(w_1 - w_2) \quad (4.40)$$

となるので、これに (4.38), (4.39) を代入すると、解の最終的な形

$$f_\kappa = A\rho^\lambda \text{Im} \left(e^{i(\rho+\zeta)} F(\lambda + i\nu, 2\lambda + 1, -2i\rho) \right) + B\rho^{-\lambda} \text{Im} \left(e^{i(\rho+\tilde{\zeta})} F(-\lambda + i\nu, -2\lambda + 1, -2i\rho) \right) \quad (4.41)$$

$$g_\kappa = \frac{c\hbar k}{E + mc^2} \left[A\rho^\lambda \text{Re} \left(e^{i(\rho+\zeta)} F(\lambda + i\nu, 2\lambda + 1, -2i\rho) \right) + B\rho^{-\lambda} \text{Re} \left(e^{i(\rho+\tilde{\zeta})} F(-\lambda + i\nu, -2\lambda + 1, -2i\rho) \right) \right] \quad (4.42)$$

が得られる。ただし $ie^{-i\zeta}A, ie^{-i\tilde{\zeta}}B$ を改めて A, B とした。これは一般解なので、 f_κ, g_κ は2つの独立な解の重ね合わせになっているが、どちらも第2項は原点で発散するので、波動関数がある条件のもとでは $B = 0$ である。

4.2 部分波の漸近形

クーロン散乱の波動関数の遠方における漸近形を求める。動径方向の波動関数 (4.41), (4.42) は2つの独立な解からなるが、(4.37) より、 $\lambda \rightarrow -\lambda$ という置き換えによって2つの解が互いに入れ替わることがわかる。したがって、一方の解の漸近形を調べれば他方の解の漸近形もすぐに求められる。

f_κ, g_κ の漸近形を得るには、合流型超幾何関数の遠方でのふるまいを知る必要がある。 $F(a, b, z)$ には、遠方でのふるまいを調べるのに便利な次の等式がある [12]。

$$F(a, b, z) = \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(-a+b)} e^{-i\pi a} z^{-a} G(a, a-b+1, -z) + \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} e^z z^{a-b} G(-a+b, -a+1, z) \quad (4.43)$$

ただし

$$-\frac{3\pi}{2} < \text{Arg } z < \frac{\pi}{2}, \quad G(a, b, z) \simeq \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n (b)_n}{n!} \frac{1}{z^n} = 1 + \frac{ab}{z} + \frac{a(a+1)b(b+1)}{2z^2} + \dots \quad (4.44)$$

$G(a, b, z)$ の式に \simeq を使っているが、これは右辺の級数が漸近級数になっているためである。この級数は一般に収束するとは限らないが、 $|z|$ を大きくしていくと、適当な n で和をうち切ることにより、正しい $G(a, b, z)$ に任意の精度で近づけることができる。 $G(a, b, z)$ の正確な表示は複素積分の形で与えられる。

散乱波の漸近形を求める。式 (4.43) を使うと

$$\begin{aligned} & e^{i(\rho+\zeta)} F(\lambda + i\nu, 2\lambda + 1, -2i\rho) \\ &= e^{i(\rho+\zeta)} \left[\frac{\Gamma(2\lambda + 1)}{\Gamma(\lambda + 1 - i\nu)} e^{-i\pi(\lambda+i\nu)} (-2i\rho)^{-(\lambda+i\nu)} G(\lambda + i\nu, -\lambda + i\nu, 2i\rho) \right. \\ & \quad \left. + \frac{\Gamma(2\lambda + 1)}{\Gamma(\lambda + i\nu)} e^{-2i\rho} (-2i\rho)^{-(\lambda+1-i\nu)} G(\lambda + 1 - i\nu, -\lambda + 1 - i\nu, -2i\rho) \right] \quad (4.45) \end{aligned}$$

となる。式 (4.44) より、この式のべき関数では $\text{Arg}(-2i\rho) = -\pi/2$ の分枝をとる。 $(-2i\rho)^{-(\lambda+i\nu)}$ を計算すると

$$\begin{aligned} (-2i\rho)^{-(\lambda+i\nu)} &= e^{-(\lambda+i\nu)\text{Log}(-2i\rho)} = e^{-(\lambda+i\nu)(\ln|-2i\rho|+i\text{Arg}(-2i\rho))} \\ &= e^{-(\lambda+i\nu)(\ln 2\rho-i\pi/2)} = e^{-\lambda\ln 2\rho} e^{-\pi\nu/2} e^{i\pi\lambda/2} e^{-i\nu\ln 2\rho} \\ &= \frac{e^{-\pi\nu/2}}{(2\rho)^\lambda} e^{i\pi\lambda/2} e^{-i\nu\ln 2\rho} \end{aligned}$$

となる。同様に

$$(-2i\rho)^{-(\lambda+1-i\nu)} = \frac{i}{2\rho} \frac{e^{\pi\nu/2}}{(2\rho)^\lambda} e^{i\pi\lambda/2} e^{i\nu\ln 2\rho}$$

である。ガンマ関数の偏角を

$$\gamma = \arg \Gamma(\lambda + 1 + i\nu) \quad (4.46)$$

と置いて、(4.45) の計算を進めると

$$\begin{aligned} &e^{i(\rho+\zeta)} F(\lambda + i\nu, 2\lambda + 1, -2i\rho) \\ &= e^{i(\rho+\zeta)} \left[\frac{\Gamma(2\lambda + 1)}{\Gamma(\lambda + 1 - i\nu)} e^{-i\pi(\lambda+i\nu)} \frac{e^{-\pi\nu/2}}{(2\rho)^\lambda} e^{i\pi\lambda/2} e^{-i\nu\ln 2\rho} G(\lambda + i\nu, -\lambda + i\nu, 2i\rho) \right. \\ &\quad \left. + \frac{(\lambda + i\nu)\Gamma(2\lambda + 1)}{\Gamma(\lambda + 1 + i\nu)} e^{-2i\rho} \frac{i}{2\rho} \frac{e^{\pi\nu/2}}{(2\rho)^\lambda} e^{i\pi\lambda/2} e^{i\nu\ln 2\rho} G(\lambda + 1 - i\nu, -\lambda + 1 - i\nu, -2i\rho) \right] \\ &= \frac{e^{\pi\nu/2}}{(2\rho)^\lambda} e^{i(\rho+\zeta)} \left[\frac{\Gamma(2\lambda + 1)}{|\Gamma(\lambda + 1 - i\nu)| e^{-i\gamma}} e^{-i\pi\lambda/2} e^{-i\nu\ln 2\rho} G(\lambda + i\nu, -\lambda + i\nu, 2i\rho) \right. \\ &\quad \left. - \frac{\Gamma(2\lambda + 1)}{|\Gamma(\lambda + 1 + i\nu)| e^{i\gamma}} e^{-2i\rho} \frac{\lambda + i\nu}{2i\rho} e^{i\pi\lambda/2} e^{i\nu\ln 2\rho} G(\lambda + 1 - i\nu, -\lambda + 1 - i\nu, -2i\rho) \right] \\ &= \frac{\Gamma(2\lambda + 1)}{|\Gamma(\lambda + 1 + i\nu)|} \frac{e^{\pi\nu/2}}{(2\rho)^\lambda} e^{i(\rho+\zeta)} \left[e^{i(-\nu\ln 2\rho - \pi\lambda/2 + \gamma)} G(\lambda + i\nu, -\lambda + i\nu, 2i\rho) \right. \\ &\quad \left. - \frac{(\kappa + i\mu)e^{-2i\zeta}}{2i\rho} e^{-i(2\rho - \nu\ln 2\rho - \pi\lambda/2 + \gamma)} G(\lambda + 1 - i\nu, -\lambda + 1 - i\nu, -2i\rho) \right] \\ &= \frac{\Gamma(2\lambda + 1)}{|\Gamma(\lambda + 1 + i\nu)|} \frac{e^{\pi\nu/2}}{(2\rho)^\lambda} \left[e^{i(\rho - \nu\ln 2\rho - \pi\lambda/2 + \gamma + \zeta)} G(\lambda + i\nu, -\lambda + i\nu, 2i\rho) \right. \\ &\quad \left. - \frac{\kappa + i\mu}{2i\rho} e^{-i(\rho - \nu\ln 2\rho - \pi\lambda/2 + \gamma + \zeta)} G(\lambda + 1 - i\nu, -\lambda + 1 - i\nu, -2i\rho) \right] \end{aligned}$$

となる。ただし、計算の途中で (4.37) を使った。式 (4.41) の定数 A を

$$A = \frac{2^\lambda e^{-\pi\nu/2} |\Gamma(\lambda + 1 + i\nu)|}{\Gamma(2\lambda + 1)} \quad (4.47)$$

と置けば、原点で有界な f_κ は

$$\begin{aligned} f_\kappa &= \text{Im} \left[e^{i(kr - \nu\ln 2kr - \pi\ell/2 + \eta_\kappa)} G(\lambda + i\nu, -\lambda + i\nu, 2ikr) \right. \\ &\quad \left. - \frac{\kappa + i\mu}{2ikr} e^{-i(kr - \nu\ln 2kr - \pi\ell/2 + \eta_\kappa)} G(\lambda + 1 - i\nu, -\lambda + 1 - i\nu, -2ikr) \right] \end{aligned} \quad (4.48)$$

となる。ただし η_κ は

$$\exp i\eta_\kappa = \exp i \left(\frac{\pi}{2} (\ell - \lambda) + \gamma + \zeta \right) \quad (4.49)$$

である。式 (4.48) で $\lambda \rightarrow -\lambda$ という置き換えをすれば、(4.41) の第 2 項の漸近形も求められる。 $G(a, b, z) = G(b, a, z)$ であるから、第 1 項と第 2 項のちがいは η_κ だけで、記号を

$$\exp i\tilde{\eta}_\kappa = \exp i \left(\frac{\pi}{2} (\ell + \lambda) + \tilde{\gamma} + \tilde{\zeta} \right), \quad \tilde{\gamma} = \arg \Gamma(-\lambda + 1 + i\nu) \quad (4.50)$$

と定義すれば、原点で発散するもう 1 つの解は

$$\begin{aligned} \tilde{f}_\kappa = \text{Im} \left[e^{i(kr - \nu \ln 2kr - \pi\ell/2 + \tilde{\eta}_\kappa)} G(\lambda + i\nu, -\lambda + i\nu, 2ikr) \right. \\ \left. - \frac{\kappa + i\mu}{2ikr} e^{-i(kr - \nu \ln 2kr - \pi\ell/2 + \tilde{\eta}_\kappa)} G(\lambda + 1 - i\nu, -\lambda + 1 - i\nu, -2ikr) \right] \end{aligned} \quad (4.51)$$

になる。ただし定数 B を

$$B = \frac{2^{-\lambda} e^{-\pi\nu/2} |\Gamma(-\lambda + 1 + i\nu)|}{\Gamma(-2\lambda + 1)} \quad (4.52)$$

と置いた。以上は厳密に成り立つ式であるが、ここで $r \rightarrow \infty$ として遠方での解のふるまいを調べる。無限遠点においては (4.44) の漸近級数は正しい G に一致して値は 1 になる。したがって (4.48), (4.51) は、 $r \rightarrow \infty$ において

$$f_\kappa = \text{Im} e^{i(kr - \nu \ln 2kr - \pi\ell/2 + \eta_\kappa)} = \sin \left(kr - \nu \ln 2kr - \frac{\pi}{2} \ell + \eta_\kappa \right) \quad (4.53)$$

$$\tilde{f}_\kappa = \text{Im} e^{i(kr - \nu \ln 2kr - \pi\ell/2 + \tilde{\eta}_\kappa)} = \sin \left(kr - \nu \ln 2kr - \frac{\pi}{2} \ell + \tilde{\eta}_\kappa \right) \quad (4.54)$$

のようにふるまう。式 (4.42) の g_κ の漸近形も上の式を使ってすぐに求められ、 $r \rightarrow \infty$ で

$$g_\kappa = \frac{c\hbar k}{E + mc^2} \text{Re} e^{i(kr - \nu \ln 2kr - \pi\ell/2 + \eta_\kappa)} = \frac{c\hbar k}{E + mc^2} \cos \left(kr - \nu \ln 2kr - \frac{\pi}{2} \ell + \eta_\kappa \right) \quad (4.55)$$

$$\tilde{g}_\kappa = \frac{c\hbar k}{E + mc^2} \text{Re} e^{i(kr - \nu \ln 2kr - \pi\ell/2 + \tilde{\eta}_\kappa)} = \frac{c\hbar k}{E + mc^2} \cos \left(kr - \nu \ln 2kr - \frac{\pi}{2} \ell + \tilde{\eta}_\kappa \right) \quad (4.56)$$

となる。

以上では原点で有界な解と発散する解の両方を扱ってきたが、現実に存在できるのは有界な解 f_κ, g_κ だけで $\tilde{f}_\kappa, \tilde{g}_\kappa$ は必要ない。しかし、原子核の電荷分布が作る (4.2) のようなポテンシャルを考えると、その場合の十分遠方における波動関数には、有界な解と発散する解の両方があらわれる。これを見るためにディラック方程式の境界条件を考える。ポテンシャルが (4.2) で与えられる場合にも、原子核の外側では点電荷のクーロンポテンシャルと同じになるから、その領域におけるディラック方程式は点電荷のときと同じである。したがって、角運動量の固有状態になる波動関数も上で求めたものと同じである。ただし、この場合には考えている領域に原点が含まれていないので、原点で発散する解があってもよい。実際には、原点で有界な解と発散する解の 2 つが必要である。なぜならば、原子核の外側の波動関数に対する境界条件は、内側の波動関数と連続になることなので、2 つの自由度が必要になるからである（波動関数は上 2 成分を表す関数と下 2 成分を表す関数の 2 つ）。したがって、原子核の外側の波動関数は、(4.41), (4.42) のように有界な解 f_κ, g_κ と発散する解 $\tilde{f}_\kappa, \tilde{g}_\kappa$ の重ね合わせになる。

原点の近くでゆがんだクーロンポテンシャル (4.2) があるときに、遠方において波動関数がどのようにふるまうか調べる。動径方向の波動関数を $u_\kappa(r), v_\kappa(r)$ とすると、原子核の内側のゆがんだクーロンポテンシャルの中で u_κ, v_κ がどうなるかはよくわからない。しかし、原子核の外側では純粋なクーロンポテンシャルにな

るから、(4.53)-(4.56) がそのまま使えて、 $r \rightarrow \infty$ での波動関数の漸近形は

$$u_\kappa = A \sin(x + \eta_\kappa) + B \sin(x + \tilde{\eta}_\kappa) \quad (4.57)$$

$$v_\kappa = \frac{c\hbar k}{E + mc^2} \left[A \cos(x + \eta_\kappa) + B \cos(x + \tilde{\eta}_\kappa) \right] \quad (4.58)$$

となる。ただし $x = kr - \nu \ln 2kr - \pi\ell/2$ と置いた。また、定数 A, B は内側と外側の波動関数が連続になるように選んでいるものとする。式 (4.57) を変形すると

$$\begin{aligned} u_\kappa &= A(\sin x \cos \eta_\kappa + \cos x \sin \eta_\kappa) + B(\sin x \cos \tilde{\eta}_\kappa + \cos x \sin \tilde{\eta}_\kappa) \\ &= \sin x (A \cos \eta_\kappa + B \cos \tilde{\eta}_\kappa) + \cos x (A \sin \eta_\kappa + B \sin \tilde{\eta}_\kappa) \end{aligned}$$

となるので、 C と δ_κ を

$$C \cos \delta_\kappa = A \cos \eta_\kappa + B \cos \tilde{\eta}_\kappa, \quad C \sin \delta_\kappa = A \sin \eta_\kappa + B \sin \tilde{\eta}_\kappa \quad (4.59)$$

と置けば、 $r \rightarrow \infty$ の漸近形は

$$u_\kappa = C \sin(x + \delta_\kappa) \quad (4.60)$$

となる。同様の計算を (4.58) に対して行うと

$$\begin{aligned} v_\kappa &= \frac{c\hbar k}{E + mc^2} \left[A(\cos x \cos \eta_\kappa - \sin x \sin \eta_\kappa) + B(\cos x \cos \tilde{\eta}_\kappa - \sin x \sin \tilde{\eta}_\kappa) \right] \\ &= \frac{c\hbar k}{E + mc^2} \left[\cos x (A \cos \eta_\kappa + B \cos \tilde{\eta}_\kappa) - \sin x (A \sin \eta_\kappa + B \sin \tilde{\eta}_\kappa) \right] \\ &= \frac{c\hbar k}{E + mc^2} C \cos(x + \delta_\kappa) \end{aligned} \quad (4.61)$$

となる。これらを純粋なクーロンポテンシャルでの漸近形 (4.53), (4.55) と比較すると、原子核の近傍におけるクーロンポテンシャルのゆがみが、遠方では波動関数の位相の変化 $\eta_\kappa \rightarrow \delta_\kappa$ になることがわかる。

式 (4.59) より位相のずれ δ_κ は

$$\tan \delta_\kappa = \frac{(A/B) \sin \eta_\kappa + \sin \tilde{\eta}_\kappa}{(A/B) \cos \eta_\kappa + \cos \tilde{\eta}_\kappa} \quad (4.62)$$

と表せるから、 A/B がわかれば位相のずれを決定できる。 A/B は数値計算によって求める。式 (4.2) のポテンシャル $V(r)$ を用いて動径方向のディラック方程式を原点から積分していくと、 $V(r) \simeq -Z\alpha c\hbar/r$ となる十分遠方の点での波動関数の値がわかる。この点では、 u_κ, v_κ は 2 つのクーロンの波動関数の重ね合わせになっているから

$$u_\kappa = A f_\kappa + B \tilde{f}_\kappa, \quad v_\kappa = A g_\kappa + B \tilde{g}_\kappa \quad (4.63)$$

が成り立つ。この式の定数 A, B は (4.57), (4.58) の A, B に対応しているが、 $r \rightarrow \infty$ ではないので、 f_κ, g_κ などは \sin や \cos でなく (4.48) のような厳密な式である。これらの比をとると

$$\frac{u_\kappa}{v_\kappa} = \frac{(A/B) f_\kappa + \tilde{f}_\kappa}{(A/B) g_\kappa + \tilde{g}_\kappa}$$

となるから、これを A/B について解けば

$$\frac{A}{B} = -\frac{\tilde{g}_\kappa u_\kappa - \tilde{f}_\kappa v_\kappa}{g_\kappa u_\kappa - f_\kappa v_\kappa} \quad (4.64)$$

が得られる。したがって、この式に数値的に求めた u_κ, v_κ を代入すれば A/B が求められる。

4.3 電子散乱の微分断面積

これまで扱ってきた波動関数は角運動量の固有状態になっていた。ここでは、このような部分波を使って散乱実験の境界条件を満足する波動関数を作り、電子-原子核弾性散乱の微分断面積を求める。解くべき方程式はディラック方程式

$$[-i\hbar\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla + mc^2\beta + V]\psi = E\psi \quad (4.65)$$

でポテンシャル V は球対称な (4.2) である。これを上 2 成分と下 2 成分に分けて書くと

$$\begin{bmatrix} mc^2 + V & -i\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla \\ -i\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla & -mc^2 + V \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi \\ \varphi' \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \varphi \\ \varphi' \end{bmatrix} \quad (4.66)$$

または

$$-i\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\varphi = (E - V + mc^2)\varphi', \quad -i\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\varphi' = (E - V - mc^2)\varphi \quad (4.67)$$

となる。

まず上のディラック方程式を解くための境界条件を設定しなければならない。境界条件は散乱実験を想定して決める。散乱実験では、ある方向に入射する電子のビームと、標的の原子核によって散らばった散乱電子があり、これらはきちんと区別することができる。したがって、電子の波動関数 ψ に対する境界条件は

$$\psi \xrightarrow{r\rightarrow\infty} \psi_A + \psi_B \quad (4.68)$$

のようになる。この式の ψ_A, ψ_B は、それぞれ入射波と散乱波を表す。実験的な長さのスケールは、原子核の長さのスケールに比べてずっと大きいから、計算しやすいように境界条件は $r \rightarrow \infty$ で与えている。計算を行うためには ψ_A, ψ_B の具体的な形を決めなければならない。

最初に入射波 ψ_A の形を決める。実験では入射電子が進む方向は 1 つに定まっているから、計算が簡単になるようにこの方向を z 軸 (x^3 軸) 方向とする。入射波はポテンシャルの詳細や散乱波の形によらず存在するから、 ψ_A と ψ_B が分離する十分遠方の点では、 ψ_A 単独で上のディラック方程式を満足しているはずである。このような r が大きいところでは、(4.67) のポテンシャル項が消えるので、ディラック方程式は

$$-i\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\varphi_A = (E + mc^2)\varphi_A', \quad -i\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\varphi_A' = (E - mc^2)\varphi_A \quad (4.69)$$

としてよい。この場合、入射波の上 2 成分 φ_A が満たす微分方程式はすぐに求められて

$$\nabla^2\varphi_A = -k^2\varphi_A, \quad k = \frac{\sqrt{E^2 - mc^2}}{\hbar c} \quad (4.70)$$

となる。この微分方程式の解として

$$\varphi_A = Ne^{ikz}\chi \quad (4.71)$$

をとれば、これは z 軸方向に進む波になっている。ただし、 N は規格化定数、 χ は入射電子のスピン状態を表す 2 成分スピノールである。 χ は入射電子のスピンを表していればどのようなものでもよいが、規格化条件

$$\chi^\dagger\chi = 1 \quad (4.72)$$

は満足しているものとする。この φ_A を (4.69) に代入すれば φ_A' の形も決まる。

$$\varphi_A' = -i\frac{\hbar c}{E + mc^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\varphi_A = N\frac{\hbar c k}{E + mc^2}e^{ikz}\sigma_z\chi \quad (4.73)$$

よって、入射波 ψ_A は

$$\psi_A = N e^{ikz} \begin{bmatrix} \chi \\ \frac{c\hbar k}{E + mc^2} \sigma_z \chi \end{bmatrix} \quad (4.74)$$

という形になる。

次に散乱波 ψ_B の形を決める。 ψ_B は原子核の影響を受けていろいろな方向に散らばった電子を表し、原点を中心にして遠くへ広がっていくが、一般にその広がり方は球対称でなく、方向によって散乱の強さや電子のスピンの状態が変わる。そのため、漸近形であってもそれを正しく求めるのは大変であるが、 ψ_B の r 依存性だけは簡単にわかる。まず、十分遠方の点では ψ_A がディラック方程式を満足するから、 $\psi_B = \psi - \psi_A$ もディラック方程式を満足している。この領域では V が点電荷のクーロンポテンシャルと同じになるので、 ψ_B はいろいろな角運動量をもつクーロンの散乱波の重ね合わせで作れる。式 (4.53), (4.54) より、クーロンの散乱波上 2 成分の動径部分 $f_\kappa(r)/r$ や $\tilde{f}_\kappa(r)/r$ は、 $r \rightarrow \infty$ のとき

$$\frac{\sin(kr - \nu \ln 2kr - \pi\ell/2 + \eta_\kappa)}{r} = \frac{(-i)^\ell e^{i\eta_\kappa}}{2i} \left(\frac{e^{i(kr - \nu \ln 2kr)}}{r} \right) - \frac{i^\ell e^{-i\eta_\kappa}}{2i} \left(\frac{e^{-i(kr - \nu \ln 2kr)}}{r} \right)$$

とふるまうから、クーロンの散乱波を重ね合わせた φ_B も

$$\varphi_B = X \frac{e^{i(kr - \nu \ln 2kr)}}{r} + Y \frac{e^{-i(kr - \nu \ln 2kr)}}{r}$$

という形になっていなければならない。ただし、2 成分の X, Y は $\hat{\mathbf{x}}$ だけの関数である。この式の第 1 項は外側に広がっていく波、第 2 項は原点に集まってくる波になっているが、散乱波 ψ_B には内向きの波は存在しないので、 $Y = 0$ となるような重ね合わせになっているはずである。よって、散乱波の上 2 成分 φ_B は

$$\varphi_B = N \frac{e^{i(kr - \nu \ln 2kr)}}{r} F(\hat{\mathbf{x}}) \chi, \quad F(\hat{\mathbf{x}}) = \begin{bmatrix} f_{\uparrow\uparrow}(\hat{\mathbf{x}}) & f_{\uparrow\downarrow}(\hat{\mathbf{x}}) \\ f_{\downarrow\uparrow}(\hat{\mathbf{x}}) & f_{\downarrow\downarrow}(\hat{\mathbf{x}}) \end{bmatrix} \quad (4.75)$$

という形に書ける。この式の 2×2 の行列 $F(\hat{\mathbf{x}})$ を散乱振幅という。 $F(\hat{\mathbf{x}})$ は、入射波と同じスピン状態 χ に作用して、 $\hat{\mathbf{x}}$ 方向に進む散乱波の振幅とスピンを与える。ただし、入射波の強度を表す定数 N は散乱振幅から取り出してある。式 (4.67) より、 φ_B を微分すると散乱波の下 2 成分 φ'_B も得られる。

$$\varphi'_B = -i \frac{c\hbar}{E + mc^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \varphi_B \quad (4.76)$$

この式の $\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla$ を極座標を使って

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla = \sigma_r \frac{\partial}{\partial r} + \sigma_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \sigma_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (4.77)$$

と表す。ただし、 $\sigma_r, \sigma_\theta, \sigma_\phi$ は $\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla$ の中の $\partial/\partial x^i$ を極座標で表して整理したときに出てくる 2×2 の行列で、それぞれ次のようになる。

$$\sigma_r = \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\phi} \\ \sin \theta e^{i\phi} & -\cos \theta \end{bmatrix}, \quad \sigma_\theta = \begin{bmatrix} -\sin \theta & \cos \theta e^{-i\phi} \\ \cos \theta e^{i\phi} & \sin \theta \end{bmatrix}, \quad \sigma_\phi = \begin{bmatrix} 0 & -ie^{-i\phi} \\ ie^{i\phi} & 0 \end{bmatrix} \quad (4.78)$$

これを使うと

$$\begin{aligned} \varphi'_B &= -i \frac{c\hbar}{E + mc^2} \left(\sigma_r \frac{\partial}{\partial r} + \sigma_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \sigma_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \left(N \frac{e^{i(kr - \nu \ln 2kr)}}{r} F(\hat{\mathbf{x}}) \chi \right) \\ &= -i \frac{c\hbar}{E + mc^2} N \left[\left(\frac{\partial}{\partial r} \frac{e^{i(kr - \nu \ln 2kr)}}{r} \right) \sigma_r F(\hat{\mathbf{x}}) \chi + \frac{e^{i(kr - \nu \ln 2kr)}}{r^2} \left(\sigma_\theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \sigma_\phi \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) F(\hat{\mathbf{x}}) \chi \right] \end{aligned} \quad (4.79)$$

となる。この式の中の r についての微分は

$$\frac{\partial}{\partial r} \frac{e^{i(kr - \nu \ln 2kr)}}{r} = \left(ik - \frac{\nu}{r} - \frac{1}{r} \right) \frac{e^{i(kr - \nu \ln 2kr)}}{r} \quad (4.80)$$

であるが、右辺の括弧の中の第2項と第3項は、第1項の $1/kr$ 程度の大きさである。電子-原子核散乱の典型的なエネルギースケールである 200 MeV の散乱を考えると、 $mc^2 = 0.5 \text{ MeV}$ より k は

$$k = \frac{\sqrt{E^2 - mc^2}}{c\hbar} \approx \frac{E}{c\hbar} \approx \frac{200 \text{ MeV}}{200 \text{ MeV fm}} = 1 \text{ fm}^{-1} = 10^{15} \text{ m}^{-1}$$

という大きさになる。一方、今考えている r の大きさは標的から検出器までの距離程度の大きさだから 1 m のオーダーである。したがって $1/kr \ll 1$ であり、(4.80) の第2項と第3項は完全に無視できる。同様の理由により、(4.79) の角括弧の中の第2項は第1項の $1/kr$ 程度の大きさであるから無視してよい。そのため、散乱波の下2成分は

$$\varphi'_B = N \frac{c\hbar k}{E + mc^2} \frac{e^{i(kr - \nu \ln 2kr)}}{r} \sigma_r F(\hat{\mathbf{x}}) \chi \quad (4.81)$$

となる。よって、上2成分と下2成分を合わせると散乱波 ψ_B は

$$\psi_B = N \frac{e^{i(kr - \nu \ln 2kr)}}{r} \begin{bmatrix} F(\hat{\mathbf{x}}) \chi \\ \frac{c\hbar k}{E + mc^2} \sigma_r F(\hat{\mathbf{x}}) \chi \end{bmatrix} \quad (4.82)$$

という形になる。

ψ_A, ψ_B の形が決まったので、 ψ に対する境界条件も決まり

$$\psi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} N \left(e^{ikz} \begin{bmatrix} \chi \\ \frac{c\hbar k}{E + mc^2} \sigma_z \chi \end{bmatrix} + \frac{e^{i(kr - \nu \ln 2kr)}}{r} \begin{bmatrix} F(\hat{\mathbf{x}}) \chi \\ \frac{c\hbar k}{E + mc^2} \sigma_r F(\hat{\mathbf{x}}) \chi \end{bmatrix} \right) \quad (4.83)$$

となる。この境界条件のもとでディラック方程式を解けば、求めた電子の波動関数からいろいろな物理量を計算できるようになるが、散乱の微分断面積を求めるだけであればディラック方程式を正確に解く必要はない。このことを見るために、微分断面積がどのように表されるかを調べてみる。微分断面積 $d\sigma/d\Omega$ の定義は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \frac{\text{単位時間に立体角 } d\Omega \text{ の中に入る散乱粒子の数}}{\text{単位時間に単位面積を通過する入射粒子の数}} \quad (4.84)$$

である。単位時間に単位面積を通過する粒子の数は、確率流束 \mathbf{j} の大きさに比例するから、量子論では単位時間・単位面積あたりの粒子数を $|\mathbf{j}|$ に置き換えて考える。散乱波の確率流束を \mathbf{j}_B とすると、単位時間に微小立体角 $d\Omega$ の中に入る散乱波の流れは、 \mathbf{j}_B にその部分の微小面積を掛けたものであるから

$$\mathbf{j}_B \times 4\pi r^2 \frac{d\Omega}{4\pi}$$

となる。これより微分断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r^2 |\mathbf{j}_B|}{|\mathbf{j}_A|} \quad (4.85)$$

と書くことができる。したがって、微分断面積を求めるには入射波と散乱波の確率流束を計算すればよい。確率流束の定義

$$\mathbf{j} = c\psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \psi \quad (4.86)$$

より、入射波 ψ_A の確率流束は

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_A &= c |N|^2 \begin{bmatrix} \chi^\dagger & \frac{c\hbar k}{E + mc^2} \chi^\dagger \sigma_z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \chi \\ \frac{c\hbar k}{E + mc^2} \sigma_z \chi \end{bmatrix} \\ &= |N|^2 \frac{c^2 \hbar k}{E + mc^2} \chi^\dagger (\boldsymbol{\sigma} \sigma_z + \sigma_z \boldsymbol{\sigma}) \chi \end{aligned}$$

となるが、 $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}$ と $\chi^\dagger \chi = 1$ を使えば

$$\mathbf{j}_A = |N|^2 \frac{2c^2 \hbar k}{E + mc^2} \mathbf{e}_z \quad (4.87)$$

になる。同様にして散乱波 ψ_B の確率流束を計算すると

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_B &= c \frac{|N|^2}{r^2} \begin{bmatrix} \chi^\dagger F^\dagger(\hat{\mathbf{x}}) & \frac{c\hbar k}{E + mc^2} \chi^\dagger F^\dagger(\hat{\mathbf{x}}) \sigma_r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F(\hat{\mathbf{x}}) \chi \\ \frac{c\hbar k}{E + mc^2} \sigma_r F(\hat{\mathbf{x}}) \chi \end{bmatrix} \\ &= \frac{|N|^2}{r^2} \frac{c^2 \hbar k}{E + mc^2} \chi^\dagger F^\dagger(\hat{\mathbf{x}}) (\boldsymbol{\sigma} \sigma_r + \sigma_r \boldsymbol{\sigma}) F(\hat{\mathbf{x}}) \chi \end{aligned}$$

となるので、 $\sigma_r = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{x}/r$ と式 (3.46) で計算した $\{\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{x}\} = 2\mathbf{x}$ を使えば

$$\mathbf{j}_B = \frac{|N|^2}{r^2} \frac{2c^2 \hbar k}{E + mc^2} (\chi^\dagger F^\dagger(\hat{\mathbf{x}}) F(\hat{\mathbf{x}}) \chi) \frac{\mathbf{x}}{r} \quad (4.88)$$

を得る。求まった $\mathbf{j}_A, \mathbf{j}_B$ を (4.85) に代入すると、電子散乱の微分断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \chi^\dagger F^\dagger(\hat{\mathbf{x}}) F(\hat{\mathbf{x}}) \chi \quad (4.89)$$

と表せるようになる。よって散乱振幅 $F(\hat{\mathbf{x}})$ さえ求まれば、散乱微分断面積は簡単に計算できる。散乱振幅は散乱波の遠方でのふるまいから決まる。

4.4 部分波展開

散乱振幅 $F(\hat{\mathbf{x}})$ を求めるために部分波展開という方法を用いる。この方法は、散乱の境界条件を満足するディラック方程式の解を部分波を使って展開する方法で、部分波の遠方でのふるまいを特徴づける位相のずれから散乱振幅を計算する。境界条件 (4.83) を満足するディラック方程式の解 ψ は、同じ微分方程式の解で角運動量の固有状態となる部分波 $\psi_{\kappa m}$ を使って次のように展開できる。

$$\psi = \sum_{\kappa m} c_{\kappa m} \psi_{\kappa m} \quad (4.90)$$

ただし、 κ は部分波上 2 成分の角運動量の固有値を表す量子数で、 \mathbf{L}^2 の固有値 ℓ や \mathbf{j}^2 の固有値 j とは

$$\kappa = \begin{cases} \ell & j = \ell - 1/2 \text{ のとき} \\ -(\ell + 1) & j = \ell + 1/2 \text{ のとき} \end{cases} \quad (4.91)$$

という関係にある。 κ と (ℓ, j) は 1 対 1 に対応してるので、以下の計算では、同じ 1 つの量に対して $c_{\kappa m}$ や $c_{\ell j m}$ のような 2 種類の表し方をすることがある。散乱振幅 $F(\hat{\mathbf{x}})$ を求めるには展開係数 $c_{\kappa m}$ を決めればよさ

そうだが、 $c_{\kappa m}$ や $F(\hat{\mathbf{x}})$ は波動関数の上 2 成分と下 2 成分で共通になっているので、4 成分を扱う必要はなく上 2 成分だけを考えればよい。 ψ の上 2 成分 φ は次の形になっている。

$$\varphi = \sum_{\kappa m} c_{\kappa m} \frac{u_{\kappa}(r)}{r} \mathcal{Y}_{\kappa m}(\hat{\mathbf{x}}) \quad (4.92)$$

ただし、 $u_{\kappa}(r)$ は動径方向のディラック方程式の解で、原子核近傍での関数形は数値計算をしなければわからないが、 $r \rightarrow \infty$ でのふるまいは (4.60) から

$$u_{\kappa}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sin\left(kr - \nu \ln 2kr - \frac{\pi}{2} \ell + \delta_{\kappa}\right)$$

となることがわかっている。 φ に対する境界条件は、(4.83) の上 2 成分をとればよいので

$$\varphi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ikz} \chi + \frac{e^{i(kr - \nu \ln 2kr)}}{r} F(\hat{\mathbf{x}}) \chi \quad (4.93)$$

となる。ただし規格化定数 N を 1 にとった。境界条件も部分波の漸近形も遠方で与えられているから、これらを比較することで展開係数 $c_{\kappa m}$ を決められる。すなわち

$$\sum_{\kappa m} c_{\kappa m} \frac{\sin(kr - \nu \ln 2kr - \pi \ell / 2 + \delta_{\kappa})}{r} \mathcal{Y}_{\kappa m}(\hat{\mathbf{x}}) = e^{ikz} \chi + \frac{e^{i(kr - \nu \ln 2kr)}}{r} F(\hat{\mathbf{x}}) \chi \quad (4.94)$$

が成り立つように $c_{\kappa m}$ を決める。この式の左辺は

$$\frac{e^{i(kr - \nu \ln 2kr)}}{r} \sum_{\kappa m} \left(c_{\kappa m} \frac{(-i)^{\ell} e^{i\delta_{\kappa}}}{2i} \mathcal{Y}_{\kappa m}(\hat{\mathbf{x}}) \right) - \frac{e^{-i(kr - \nu \ln 2kr)}}{r} \sum_{\kappa m} \left(c_{\kappa m} \frac{i^{\ell} e^{-i\delta_{\kappa}}}{2i} \mathcal{Y}_{\kappa m}(\hat{\mathbf{x}}) \right) \quad (4.95)$$

と変形できるので、右辺もこれに合わせた形に書き直す。まず (4.94) の右辺第 2 項は、 $F(\hat{\mathbf{x}}) \chi$ を球面調和スピノールで展開すれば

$$\frac{e^{i(kr - \nu \ln 2kr)}}{r} F(\hat{\mathbf{x}}) \chi = \frac{e^{i(kr - \nu \ln 2kr)}}{r} \sum_{\kappa m} f_{\kappa m} \mathcal{Y}_{\kappa m}(\hat{\mathbf{x}}) \quad (4.96)$$

と表すことができる。同様にして、(4.94) の右辺第 1 項を動径部分と球面調和スピノールに分離する。 $e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta}$ を動径部分と角度部分に分離するには、特殊関数の公式

$$e^{ikr \cos \theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) i^{\ell} j_{\ell}(kr) P_{\ell}(\cos \theta) \quad (4.97)$$

を使えばよい。ただし、 j_{ℓ} は ℓ 次の球ベッセル関数、 P_{ℓ} は ℓ 次のルジャンドル多項式である。これを使うと

$$e^{ikz} \chi = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) i^{\ell} j_{\ell}(kr) P_{\ell}(\cos \theta) \chi$$

になるが、 $P_{\ell}(\cos \theta) \chi$ は球面調和スピノールによって

$$P_{\ell}(\cos \theta) \chi = \sum_{j=\ell \pm \frac{1}{2}} \sum_{m=-j}^j p_{\ell j m} \mathcal{Y}_{\ell j m}(\hat{\mathbf{x}}) \quad \left(P_0(\cos \theta) \chi = \sum_{m=\pm \frac{1}{2}} p_{0 \frac{1}{2} m} \mathcal{Y}_{0 \frac{1}{2} m}(\hat{\mathbf{x}}) \right) \quad (4.98)$$

と展開できるので

$$e^{ikz} \chi = \sum_{\kappa m} p_{\kappa m} (2\ell + 1) i^{\ell} j_{\ell}(kr) \mathcal{Y}_{\kappa m}(\hat{\mathbf{x}}) \quad (4.99)$$

と表すことができる。さらに、今考えたい $r \rightarrow \infty$ での関係式では、球ベッセル関数を漸近形

$$j_\ell(kr) \simeq \frac{\sin(kr - \pi\ell/2)}{kr} \quad (4.100)$$

で置き換えてよく

$$\begin{aligned} e^{ikz}\chi &= \sum_{\kappa m} p_{\kappa m} (2\ell + 1) i^\ell \frac{\sin(kr - \pi\ell/2)}{kr} \mathcal{Y}_{\kappa m}(\hat{\mathbf{x}}) \\ &= \frac{e^{ikr}}{r} \sum_{\kappa m} \left(p_{\kappa m} \frac{2\ell + 1}{2ik} \mathcal{Y}_{\kappa m}(\hat{\mathbf{x}}) \right) - \frac{e^{-ikr}}{r} \sum_{\kappa m} \left(p_{\kappa m} \frac{(-1)^\ell (2\ell + 1)}{2ik} \mathcal{Y}_{\kappa m}(\hat{\mathbf{x}}) \right) \end{aligned} \quad (4.101)$$

となる。したがって、(4.95), (4.96), (4.101) を (4.94) に代入すれば

$$\begin{aligned} &\frac{e^{i(kr - \nu \ln 2kr)}}{r} \sum_{\kappa m} \left(c_{\kappa m} \frac{(-i)^\ell e^{i\delta_\kappa}}{2i} \mathcal{Y}_{\kappa m} \right) - \frac{e^{-i(kr - \nu \ln 2kr)}}{r} \sum_{\kappa m} \left(c_{\kappa m} \frac{i^\ell e^{-i\delta_\kappa}}{2i} \mathcal{Y}_{\kappa m} \right) \\ &= \frac{e^{ikr}}{r} \sum_{\kappa m} \left(p_{\kappa m} \frac{2\ell + 1}{2ik} \mathcal{Y}_{\kappa m} \right) - \frac{e^{-ikr}}{r} \sum_{\kappa m} \left(p_{\kappa m} \frac{(-1)^\ell (2\ell + 1)}{2ik} \mathcal{Y}_{\kappa m} \right) + \frac{e^{i(kr - \nu \ln 2kr)}}{r} \sum_{\kappa m} f_{\kappa m} \mathcal{Y}_{\kappa m} \end{aligned} \quad (4.102)$$

$$(4.103)$$

という関係式が得られる。これは恒等式であるから両辺の r 依存性を比較すると、(4.102) には $e^{-i(kr - \nu \ln 2kr)}/r$ に比例する項があるが (4.103) にはないので、すべての $c_{\kappa m}$ は 0 となる。これより上の式が 0 になるから、下の式の展開係数もすべて 0 でなければならず、得られる結果は無意味なものである。実はこの関係式にはまちがいがある。すぐにわかるように、まちがっている部分は入射波の漸近形から出てきた $e^{\pm ikr}/r$ に比例する 2 つの項である。なぜならば、上の式の r 依存性は厳密解である部分波の漸近形から導いたものなので、これ以外の形を考慮することができず、そのため下の式も $e^{\pm i(kr - \nu \ln 2kr)}/r$ の線形結合になっていなければならないからである。したがって、まちがいを直すためには入射波の $e^{\pm ikr}$ を $e^{\pm i(kr - \nu \ln 2kr)}$ に変えればよい。これによって入射波は定数 ν と関係するようになるが、この定数

$$\nu = -\frac{Z\alpha E}{\hbar k}$$

はクーロン力によるものなので、原点にある原子核の電荷の影響が遠方の入射波まで及ぶことになる。これより、入射波の漸近形を求めるところでポテンシャルを完全に無視してしまったことがまちがいの原因であったとわかる。クーロン力は入射波の動径部分だけでなく、角度部分も変えてしまうかもしれないが、 $r \rightarrow \infty$ を考える限りは角度依存性を変える必要はない。 r 依存性の修正によって入射波は次のように変わる。

$$\varphi_A = \frac{e^{i(kr - \nu \ln 2kr)}}{r} \sum_{\ell=0}^{\infty} \left(\frac{2\ell + 1}{2ik} P_\ell(\cos \theta) \right) \chi - \frac{e^{-i(kr - \nu \ln 2kr)}}{r} \sum_{\ell=0}^{\infty} \left(\frac{(-1)^\ell (2\ell + 1)}{2ik} P_\ell(\cos \theta) \right) \chi \quad (4.104)$$

このように修正した入射波は、最初に求めた $e^{ikz}\chi$ に一致しないはずだが、 $e^{ikz}\chi$ からのずれは $e^{-i\nu \ln 2kr}$ 程度と考えられるので、入射波の下 2 成分の式 (4.73) はほとんど変更せずに使えて

$$\varphi'_A = \frac{\hbar k}{E + mc^2} \sigma_z \varphi_A \quad (4.105)$$

となるはずである。実際、散乱波 ψ_B には最初から $e^{-i\nu \ln 2kr}$ という因子が掛かっていたが、この影響は遠方で 0 になった。また、微分断面積を求める式 (4.89) も変更せずに使える。

以上で正しい関係式がどのようなものになるかわかったので、この関係式を使って展開係数 $c_{\kappa m}, f_{\kappa m}$ を決める。 $p_{\kappa m}$ は入射波のスピン状態 χ だけで決まるから既知の定数である。修正した (4.103) を (4.102) と比較すると、展開係数の間に成り立つ次の関係式が得られる。

$$c_{\kappa m} \frac{(-i)^\ell e^{i\delta_\kappa}}{2i} = p_{\kappa m} \frac{2\ell + 1}{2ik} + f_{\kappa m} \quad (4.106)$$

$$c_{\kappa m} \frac{i^\ell e^{-i\delta_\kappa}}{2i} = p_{\kappa m} \frac{(-1)^\ell (2\ell + 1)}{2ik} \quad (4.107)$$

まず、(4.107) から部分波展開の係数 $c_{\kappa m}$ が決まり

$$c_{\kappa m} = \frac{1}{k} (2\ell + 1) i^\ell e^{i\delta_\kappa} p_{\kappa m} \quad (4.108)$$

となる。そして、これを (4.106) に代入すれば、散乱振幅の展開係数 $f_{\kappa m}$ が

$$f_{\kappa m} = \frac{1}{2ik} (2\ell + 1) (e^{2i\delta_\kappa} - 1) p_{\kappa m} \quad (4.109)$$

と定まる。よって散乱振幅 $F(\hat{\mathbf{x}})$ は

$$F(\hat{\mathbf{x}}) \chi = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell j m} (2\ell + 1) (e^{2i\delta_\kappa} - 1) p_{\ell j m} \mathcal{Y}_{\ell j m}(\hat{\mathbf{x}}) \quad (4.110)$$

から計算できる。

この式には $P_\ell(\cos \theta) \chi$ の展開係数 $p_{\ell j m}$ が含まれているので、このままでは扱いにくい。そこで、 j, m についての和を実行して $p_{\ell j m}$ を消去する。軌道角運動量 ℓ をもつ状態に対する全角運動量についての射影演算子を

$$\Lambda_+ = \frac{\ell + 1 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\ell}}{2\ell + 1}, \quad \Lambda_- = \frac{\ell - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\ell}}{2\ell + 1} \quad (\Lambda_+ + \Lambda_- = 1) \quad (4.111)$$

で定義する。ただし、 $\boldsymbol{\ell}$ は軌道角運動量演算子を \hbar で割ったものを表し、 $\boldsymbol{\ell} = -i\mathbf{x} \times \nabla$ である。 $\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\ell}$ は

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\ell} = \left(\boldsymbol{\ell} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \right)^2 - \ell^2 - \frac{3}{4}$$

と変形できるので、 $\mathcal{Y}_{\ell j m}$ は $\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\ell}$ の固有状態となり、固有値は

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\ell} \mathcal{Y}_{\ell j m} = \begin{cases} \ell \mathcal{Y}_{\ell j m} & j = \ell + 1/2 \text{ のとき} \\ -(\ell + 1) \mathcal{Y}_{\ell j m} & j = \ell - 1/2 \text{ のとき} \end{cases} \quad (4.112)$$

である。したがって、射影演算子を $\mathcal{Y}_{\ell j m}$ に作用させると

$$\Lambda_\pm \mathcal{Y}_{\ell j m} = \delta_{j, \ell \pm \frac{1}{2}} \mathcal{Y}_{\ell j m} \quad (4.113)$$

となる。この性質を使うと、射影演算子を (4.98) に作用させたものは

$$\Lambda_\pm P_\ell(\cos \theta) \chi = \sum_{m=-j_\pm}^{j_\pm} p_{\ell j_\pm m} \mathcal{Y}_{\ell j_\pm m}(\hat{\mathbf{x}}) \quad \left(j_\pm = \ell \pm \frac{1}{2} \right) \quad (4.114)$$

になるから、(4.110) は

$$\begin{aligned} F(\hat{\mathbf{x}}) \chi &= \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \sum_{j=\ell \pm \frac{1}{2}} (e^{2i\delta_\kappa} - 1) \sum_{m=-j}^j p_{\ell j m} \mathcal{Y}_{\ell j m}(\hat{\mathbf{x}}) \\ &= \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \left[(e^{2i\delta_\kappa=-\ell-1} - 1) \Lambda_+ P_\ell(\cos \theta) \chi + (e^{2i\delta_\kappa=\ell} - 1) \Lambda_- P_\ell(\cos \theta) \chi \right] \end{aligned}$$

と変形することができる。これより散乱振幅 $F(\hat{\mathbf{x}})$ は

$$\begin{aligned}
F(\hat{\mathbf{x}}) &= \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \left[(e^{2i\delta_{-\ell-1}} - 1) \Lambda_+ + (e^{2i\delta_{\ell}} - 1) \Lambda_- \right] P_{\ell}(\cos \theta) \\
&= \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} \left[(e^{2i\delta_{-\ell-1}} - 1) (\ell+1 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\ell}) + (e^{2i\delta_{\ell}} - 1) (\ell - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\ell}) \right] P_{\ell}(\cos \theta) \\
&= \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} \left[(\ell+1) (e^{2i\delta_{-\ell-1}} - 1) + \ell (e^{2i\delta_{\ell}} - 1) \right] P_{\ell}(\cos \theta) \\
&\quad + \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} \left[e^{2i\delta_{-\ell-1}} - e^{2i\delta_{\ell}} \right] \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\ell} P_{\ell}(\cos \theta)
\end{aligned} \tag{4.115}$$

となる。 $\boldsymbol{\ell}$ を極座標で表すと

$$\boldsymbol{\ell} = -i\mathbf{e}_r \times \left(\mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_{\theta} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \mathbf{e}_{\phi} \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) = -i \left(\mathbf{e}_{\phi} \frac{\partial}{\partial \theta} - \mathbf{e}_{\theta} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \tag{4.116}$$

となるから

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\ell} P_{\ell}(\cos \theta) = -i \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{e}_{\phi} \frac{d}{d\theta} P_{\ell}(\cos \theta) \tag{4.117}$$

である。ルジャンドル陪関数 P_{ℓ}^m とルジャンドル多項式 P_{ℓ} の関係は

$$P_{\ell}^m(z) = (1-z^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dz^m} P_{\ell}(z) \tag{4.118}$$

で与えられるが、 $m=1$ の場合を考えると

$$P_{\ell}^1(\cos \theta) = \sin \theta \frac{d}{d(\cos \theta)} P_{\ell}(\cos \theta) = -\frac{d}{d\theta} P_{\ell}(\cos \theta) \tag{4.119}$$

となるので

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\ell} P_{\ell}(\cos \theta) = i \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} P_{\ell}^1(\cos \theta) \tag{4.120}$$

と表せることがわかる。ただし、 \mathbf{e}_{ϕ} を \mathbf{n} と書いた。 \mathbf{n} は

$$\mathbf{n} = \mathbf{e}_{\phi} = (-\sin \phi, \cos \phi, 0) = \frac{\mathbf{e}_z \times \mathbf{e}_r}{|\mathbf{e}_z \times \mathbf{e}_r|} \tag{4.121}$$

と表せばわかるように、入射方向 \mathbf{e}_z と散乱方向 \mathbf{e}_r に直交するベクトルである。式 (4.120) を (4.115) に代入すると、位相のずれから散乱振幅を求める公式

$$F(\hat{\mathbf{x}}) = A(\theta) + B(\theta) \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \tag{4.122}$$

$$A(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} \left[(\ell+1) (e^{2i\delta_{-\ell-1}} - 1) + \ell (e^{2i\delta_{\ell}} - 1) \right] P_{\ell}(\cos \theta) \tag{4.123}$$

$$B(\theta) = \frac{1}{2k} \sum_{\ell=1}^{\infty} \left[e^{2i\delta_{-\ell-1}} - e^{2i\delta_{\ell}} \right] P_{\ell}^1(\cos \theta) \tag{4.124}$$

が得られる。そして、これを (4.89) に代入すれば微分断面積が計算できて

$$\begin{aligned}
\frac{d\sigma}{d\Omega} &= \chi^{\dagger} (A^* + B^* \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) (A + B \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \chi \\
&= |A|^2 + |B|^2 + 2 \operatorname{Re} (A^* B) (\chi^{\dagger} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \chi)
\end{aligned} \tag{4.125}$$

となる。この式の $\chi^\dagger \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \chi$ は、入射電子のスピン方向 \mathbf{n} の期待値である。この期待値は1つ1つの電子を見ればいろいろな値をとるが、偏極していない多数の電子の散乱を考える場合には0になる。このような場合には、微分断面積は散乱角 θ だけの関数で

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |A(\theta)|^2 + |B(\theta)|^2 \quad (4.126)$$

となる。

4.5 微分断面積の計算方法

電子-原子核散乱の微分断面積を計算する手順は次のようになる。まず、原子核の電荷分布から (4.2) のポテンシャル $V(r)$ を計算する。次に、 $V(r)$ を使って動径方向のディラック方程式を数値的に解き、部分波の位相のずれ δ_κ を求める。そして δ_κ を使って (4.123), (4.124) の級数を計算し、 $A(\theta)$, $B(\theta)$ を求めることができる。しかし、実際に (4.123), (4.124) の級数を計算してみると、 l を大きくしていても級数の各項が小さくならず、収束値に近い値をうまく得ることはできない。そのため、数値計算に (4.123), (4.124) を直接使うことはできないが、これらの式から収束しやすい別の級数を作り $A(\theta)$, $B(\theta)$ を求める方法が見つけられている [11]。ここではその方法について述べる。

2つの級数が収束しにくくなっている原因はクーロンポテンシャルにある。一般に短距離力（電子-原子核散乱の場合には原子核近傍におけるクーロンポテンシャルのゆがみ）による位相のずれは、角運動量の増加とともに急速に0に近づく。古典的に考えると、粒子の角運動量が大きい場合には散乱の衝突径数も大きくなるので、粒子は短距離ポテンシャルの作用範囲に入ることなく通り過ぎてしまう。したがって、短距離力の影響を受けるのは角運動量が小さい状態だけである。しかし、クーロンポテンシャルは到達距離が無限大であるため、角運動量の大きい状態もその影響を受け位相がずれる。そのため、 l が大きくなっても $e^{2i\delta_\kappa} \rightarrow 1$ とならず、級数 (4.123), (4.124) の収束は非常に遅くなる。

クーロンポテンシャルが散乱振幅を収束しにくくしていることは数式からも見ることができる。非相対論ではクーロン散乱の散乱振幅を解析的に求めることができ

$$f(\theta) = -\frac{\mu e^{i\eta}}{k(1 - \cos\theta)}, \quad \eta = -\mu \ln\left(\frac{1 - \cos\theta}{2}\right) + 2 \arg \Gamma(1 + i\mu) \quad (4.127)$$

という結果になる。ただし μ は (4.18) で定義した定数で、 $f(\theta)$ が散乱振幅を表す。 $f(\theta)$ は相対論の $A(\theta)$ に対応するものだが、 $\theta = 0$ で特異性をもっていることがわかる。相対論ではクーロン散乱の散乱振幅を解析的に求めることはできないが、非相対論と同様に $\theta = 0$ に特異性をもっていることが予想される。そして、この特異性のために級数の収束が遅くなっていると考えられる。

散乱振幅の収束を速めるためには特異性を取り除けばよい。 $A(\theta)$ を求める式は

$$A(\theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} a_\ell P_\ell(\cos\theta) \quad (4.128)$$

という構造をしているが、この式に $1 - \cos\theta$ をかけて

$$A'(\theta) = (1 - \cos\theta) A(\theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} a_\ell (1 - \cos\theta) P_\ell(\cos\theta) \quad (4.129)$$

という量を考える。この $A'(\theta)$ の特異性は $A(\theta)$ の特異性よりもやわらいでいるから、 $A'(\theta)$ はもとの $A(\theta)$ よりもよい性質をもっているはずである。ただし、この形のままで級数の収束性は最初と何も変わっていない

いので、少し変形する必要がある。ルジャンドル多項式の漸化式

$$(\ell + 1) P_{\ell+1}(z) - (2\ell + 1) z P_{\ell}(z) + \ell P_{\ell-1}(z) = 0 \quad (4.130)$$

を使うと

$$(1 - z) P_{\ell}(z) = P_{\ell}(z) - \frac{\ell + 1}{2\ell + 1} P_{\ell+1}(z) - \frac{\ell}{2\ell + 1} P_{\ell-1}(z) \quad (4.131)$$

という関係式が得られる。これを使うと $A'(\theta)$ は

$$\begin{aligned} A'(\theta) &= \sum_{\ell=0}^{\infty} a_{\ell} \left(P_{\ell}(\cos \theta) - \frac{\ell + 1}{2\ell + 1} P_{\ell+1}(\cos \theta) - \frac{\ell}{2\ell + 1} P_{\ell-1}(\cos \theta) \right) \\ &= \sum_{\ell=0}^{\infty} a_{\ell} P_{\ell}(\cos \theta) - \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{\ell}{2\ell - 1} a_{\ell-1} P_{\ell}(\cos \theta) - \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{\ell + 1}{2\ell + 3} a_{\ell+1} P_{\ell}(\cos \theta) \\ &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \left(a_{\ell} - \frac{\ell}{2\ell - 1} a_{\ell-1} - \frac{\ell + 1}{2\ell + 3} a_{\ell+1} \right) P_{\ell}(\cos \theta) \end{aligned}$$

と変形できる。ここで a'_{ℓ} を

$$a'_{\ell} = a_{\ell} - \frac{\ell}{2\ell - 1} a_{\ell-1} - \frac{\ell + 1}{2\ell + 3} a_{\ell+1} \quad (4.132)$$

と置けば $A'(\theta)$ は

$$A'(\theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} a'_{\ell} P_{\ell}(\cos \theta) \quad (4.133)$$

という形になる。この式はもとの級数 (4.128) と同じ形になっているが、 $A'(\theta)$ からは特異性が除かれていることを考慮すると、もとの級数よりも速く収束することが予想される。したがって $A(\theta)$ を求める場合には、まず (4.132) から a'_{ℓ} を計算し、収束しやすい $A'(\theta)$ を求めてから、それを $1 - \cos \theta$ で割ってもとの $A(\theta)$ にもどすようにする。実際には a'_{ℓ} に改めて (4.132) を適用し、新しい係数 a''_{ℓ} を得るという操作を何回か繰り返す必要がある。式 (4.132) の変換を n 回行って和を計算した場合は、最後に $(1 - \cos \theta)^n$ で割ってもとの $A(\theta)$ にもどす。 n としては $2 \sim 4$ がもっともよい。

実際にこの方法を使う場合には次の点に注意する。数値計算では無限和を扱えないから

$$A(\theta) \simeq \sum_{\ell=0}^L a_{\ell} P_{\ell}(\cos \theta) \quad (4.134)$$

によって $A(\theta)$ を近似することになる。ただし L は、 $\delta_{\kappa} - \eta_{\kappa} \approx 0$ となるところにとる。この有限和では a_{L+1} が存在しないから、(4.132) を使って a'_L を計算することはできない。そのため、 $A'(\theta)$ を求める近似和としては

$$A'(\theta) \simeq \sum_{\ell=0}^{L-1} a'_{\ell} P_{\ell}(\cos \theta) \quad (4.135)$$

を使うのが正しい。しかし、 $\ell \geq L + 1$ に対しては $a_{\ell} = 0$ と考えれば a'_L や a'_{L+1} も計算できるので

$$A'(\theta) \simeq \sum_{\ell=0}^{L-1} a'_{\ell} P_{\ell}(\cos \theta) + \left(a'_L P_L(\cos \theta) + a'_{L+1} P_{L+1}(\cos \theta) \right)$$

という近似和も考えられる。この式の方がより正確な結果を与えそうに思えるが、実際にこの式を使って計算してみると、求めた $A(\theta)$ は何もしない場合の $A(\theta)$ とまったく同じになる。この理由は $A'(\theta)$ を導いた過程を見直してみるとわかる。つまり、 $a'_L P_L + a'_{L+1} P_{L+1}$ を除くことにこの方法の本質がある。

$B(\theta)$ を求める方法も $A(\theta)$ と同じである。ルジャンドル陪関数の漸化式

$$\ell P_{\ell+1}^1(z) - (2\ell + 1)z P_{\ell}^1(z) + (\ell + 1)P_{\ell-1}^1(z) = 0 \quad (4.136)$$

を使うと

$$B(\theta) = \sum_{\ell=1}^{\infty} b_{\ell} P_{\ell}^1(\cos \theta) \quad (4.137)$$

に対して

$$B'(\theta) = (1 - \cos \theta) B(\theta) = \sum_{\ell=1}^{\infty} b'_{\ell} P_{\ell}^1(\cos \theta) \quad (4.138)$$

$$b'_{\ell} = b_{\ell} - \frac{\ell - 1}{2\ell - 1} b_{\ell-1} - \frac{\ell + 2}{2\ell + 3} b_{\ell+1} \quad (4.139)$$

という式を導ける。

図 8 は、 ^{208}Pb をターゲットにした場合の微分断面積の計算例である ($E = 300 \text{ MeV}$)。 $A(\theta)$, $B(\theta)$ を計算するときの和の上限はすべての図で共通して $L = 30$ であるが、 $\{a_{\ell}, b_{\ell}\} \rightarrow \{a'_{\ell}, b'_{\ell}\}$ の変換を行う回数 n はそれぞれ変えてある。

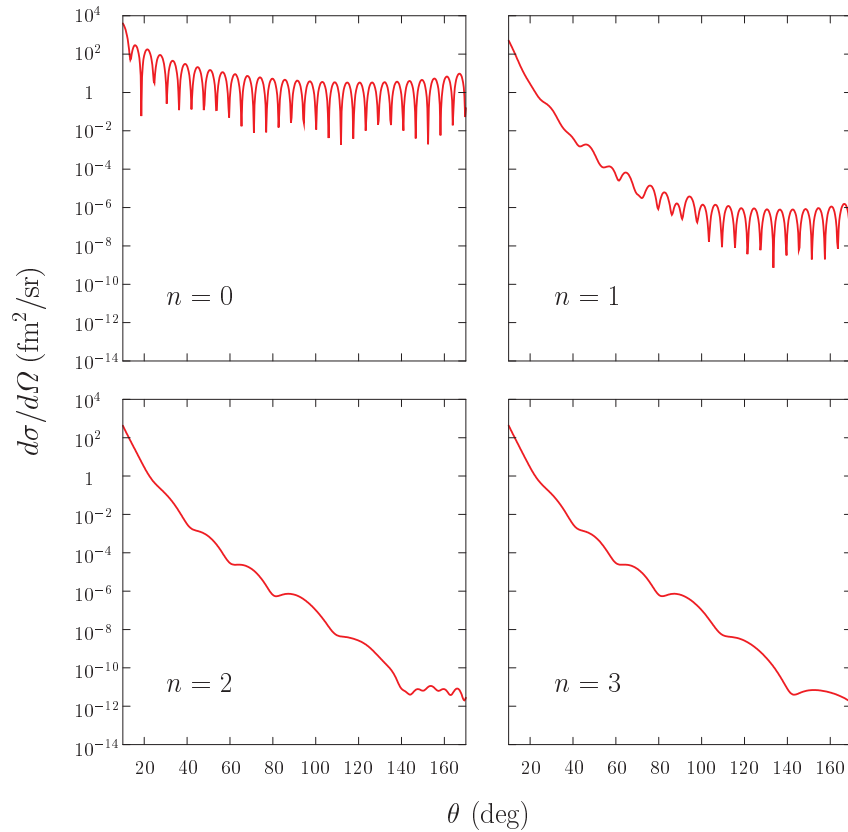


図 8 微分断面積の収束性

5 計算結果と考察

5.1 微分断面積の計算結果

原子核の相対論的模型と位相のずれを使って計算した電子-原子核弾性散乱の微分断面積を実験データと比較する。ただし以下に示す計算結果では、計算に必要となるラグランジアンのパラメーターとして表 2 の NL3 を使っている。

最初に ^{208}Pb についての計算結果を示す。陽子数と中性子数を $Z = 82, N = 126$ としてディラック・ハートリー方程式を解き、電荷分布を求めると図 9 のような電荷分布が得られる。そして、この電荷分布を用いて電子のポテンシャルを計算し、電子散乱の微分断面積を求めると、その次の図 10–13 のような結果が得られる。ただし、微分断面積の図では縦軸の目盛を対数目盛にしてある。まず図 10 は、運動エネルギー 52.9 MeV の電子を鉛に投射したときの微分断面積のグラフで、赤色の曲線が数値計算の結果を表している。いっしょに示した青色の曲線は、鉛の電荷分布の代わりに点電荷のクーロンポテンシャル $-Z\alpha\hbar/r$ ($Z = 82$) を使って計算した微分断面積である。また、これらを実験データと比較するために、実験値 [13] を黒い点で示した。この図では実験値と計算結果はすべての角度でよく一致しているように見える。また、鉛の微分断面積を点電荷の微分断面積と比較すると、 $\theta \approx 30^\circ$ までは両者は同じくらいの大きさになっているが、それ以上の角度では鉛の微分断面積の方が点電荷よりもずっと小さくなる。図 7 を見るとわかるように、原子核の電荷分布によるポテンシャルの方が点電荷のクーロンポテンシャルよりも弱いから、図 10 のように微分断面積も小さくなると思われる。しかし、ほかの微分断面積の図と比べればわかるように、このエネルギーでは鉛の微分断面積と点電荷の微分断面積はグラフの形がよく似ている。電子のエネルギーがより大きい図 11–13 では、図 10 にはない特徴的なでこぼこが現れる。このでこぼこの極小部分は回折極小と呼ばれ、原子核の表面で回折を起こした電子線の干渉効果によってできる。回折極小は原子核の構造を示す 1 つの目印である。このような原子核の特徴が微分断面積に現れるためには、電子の波長が原子核の大きさよりも小さくなっていないなければならないが、実際に電子の波長 $\lambda = 2\pi/k$ を求めてみると、電子の運動エネルギーが 52.9 MeV のときには $\lambda = 23$ fm、248.2 MeV のときには $\lambda = 5$ fm となる。図 11 や図 12 の計算結果を実験データと比較してみると、 θ が小さいところでは実験と計算はよく一致するが、 θ が大きいところではずれが生じる。古典的なラザフォード散乱

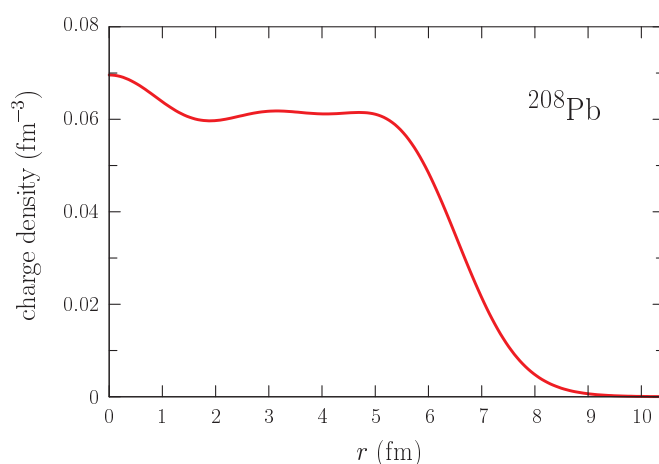


図 9 ^{208}Pb の電荷分布

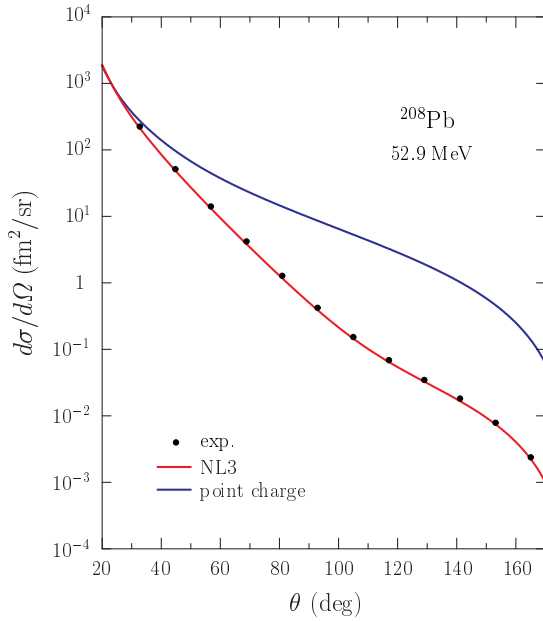


図 10 微分断面積 (^{208}Pb , 52.9 MeV)

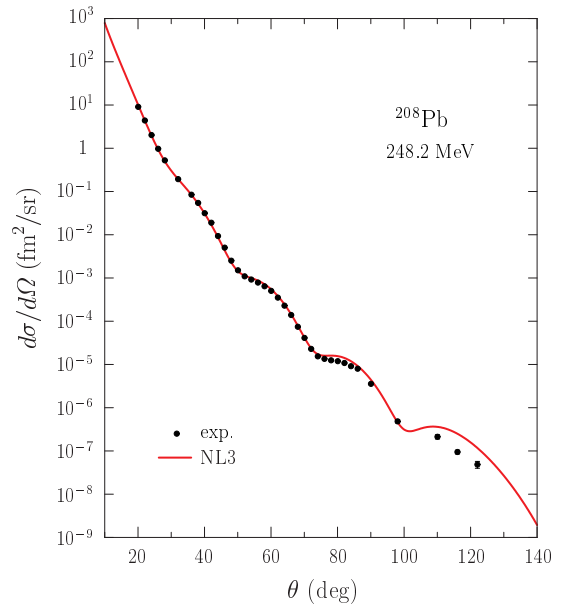


図 11 微分断面積 (^{208}Pb , 248.2 MeV)

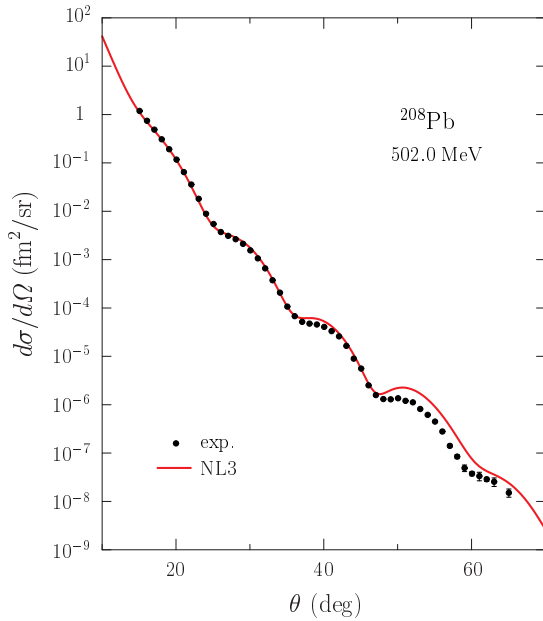


図 12 微分断面積 (^{208}Pb , 502.0 MeV)

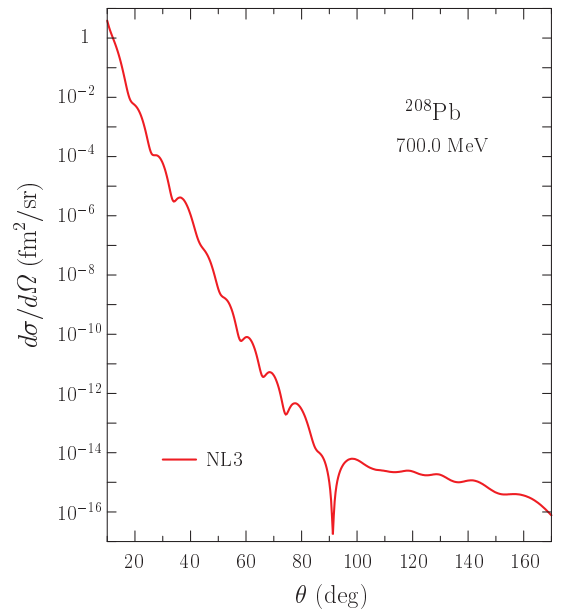


図 13 微分断面積 (^{208}Pb , 700.0 MeV)

では、衝突径数が小さい散乱の場合に粒子の散乱角が大きくなるから、散乱角が大きいところで一致が悪くなるということは、衝突径数の小さい散乱の記述がうまくいっていないことになる。つまり、鉛の中心付近の電荷分布はあまりよく求まっていない。しかし逆に考えると、表面付近の電荷分布はよく記述できていると言える。また実験と計算は定性的には一致しているから、実際の鉛の電荷分布もほぼ図 9 のようなものになっていると考えられる。最後に 700 MeV の図 13 を見てみる。この図は計算結果だけを示したもので、 $\theta = 10^\circ$ か

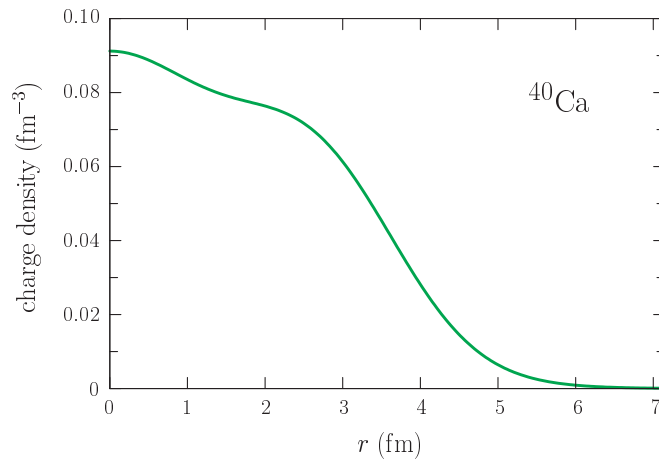


図 14 ^{40}Ca の電荷分布

ら $\theta = 170^\circ$ までの散乱を調べたものであるが、 $\theta \gtrsim 90^\circ$ での微分断面積のふるまいがそれよりも小さい角度での減少のしかたと一致していない。この不一致は数値計算の誤差によるもので、微分断面積が非常に小さくなる後方では、誤差の影響が相対的に大きくなり、精度のよい結果が得られなくなる。したがって、図 13 の $\theta \gtrsim 90^\circ$ における計算結果はまちがっている。正しい結果を得るためには数値計算の精度を上げるように工夫しなければならないが、実験的にもそのような非常に弱い電子線を測定することは難しいから、実験との比較を行う限りは数値計算の誤差はあまり問題にならない。 $\theta \lesssim 90^\circ$ での計算結果は正しいので、この部分を前の 3 つの図と比較すると、エネルギーが大きい散乱ほど、 θ の増加とともに微分断面積が急速に小さくなっていくことがわかる。電子のエネルギーが大きくなると、ポテンシャルの影響が相対的に小さくなって電子は素通りするはずだから、このような減少は当然のものと考えられる。

以上では ^{208}Pb についての結果だけを見てきたが、ラグランジアンと平均場近似を使った原子核のモデルでは、質量数の小さい原子核を除けば、ほとんどすべての原子核の性質をうまく記述できるので、 Z と N を変更すれば ^{208}Pb 以外の原子核の電荷分布も求められる。その例として、図 14 から図 19 に ^{40}Ca と ^{90}Zr の電

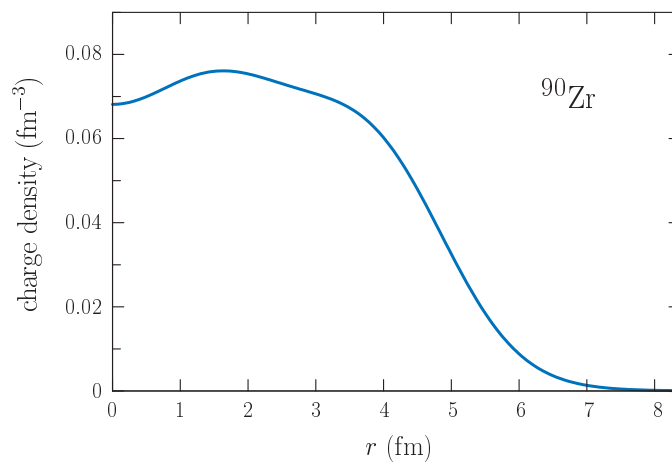


図 15 ^{90}Zr の電荷分布

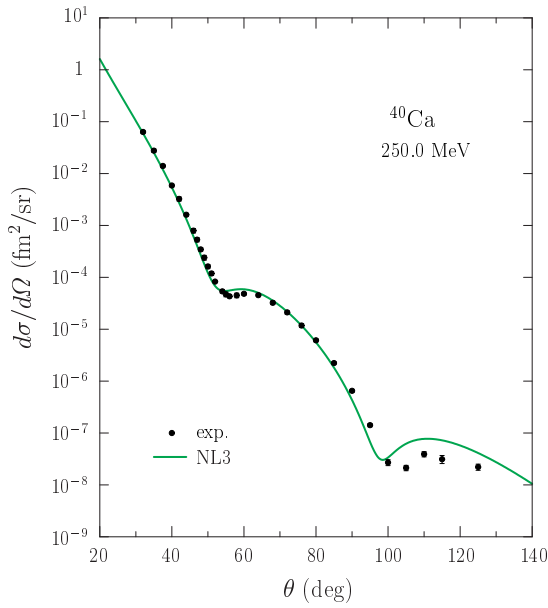


図 16 微分断面積 (^{40}Ca , 250.0 MeV)

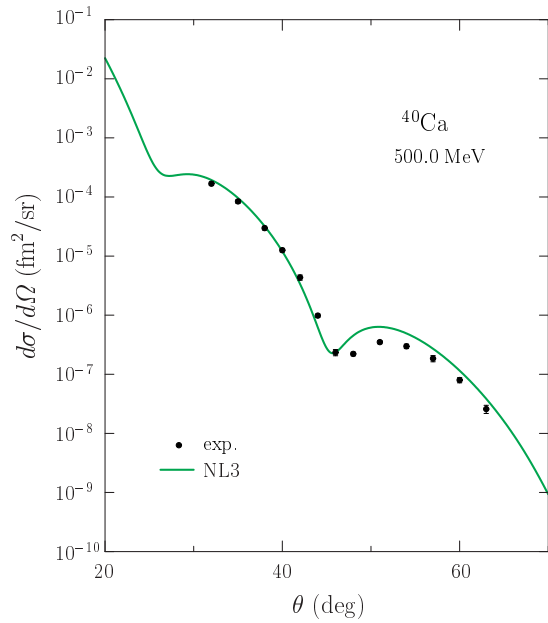


図 17 微分断面積 (^{40}Ca , 500.0 MeV)

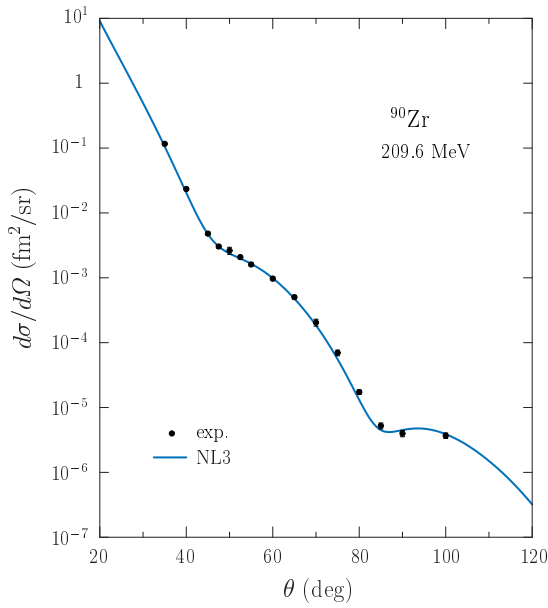


図 18 微分断面積 (^{90}Zr , 209.6 MeV)

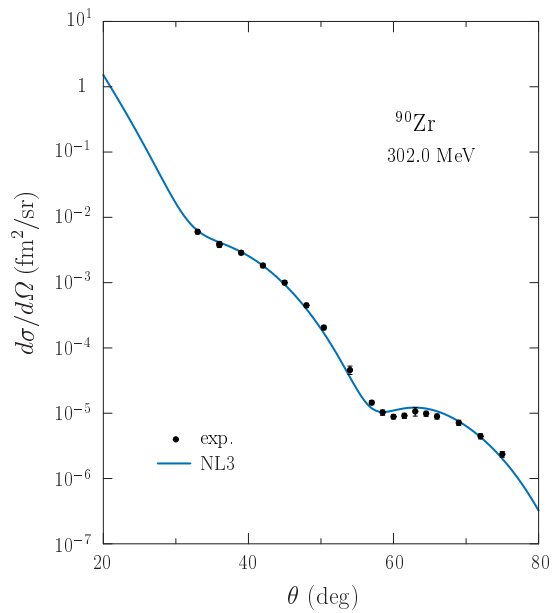


図 19 微分断面積 (^{90}Zr , 302.0 MeV)

荷分布と微分断面積を示す。微分断面積の実験値は、 ^{40}Ca については参考文献 [14]、 ^{90}Zr については参考文献 [15] のものを用いた。これらの原子核においても回折極小・極大が現れるが、質量数の小さい原子核ほど極小部分がより鮮明になっている。実験との一致は鉛の場合と同様で、 θ の小さいところでは実験と計算はよく合うが、 θ の大きいところでは一致が悪くなる。とくに極小・極大の部分でずれが大きくなっている。

以上の微分断面積の計算結果は、少なくとも散乱角の小さい部分では、実験とよく一致しているように見えた。しかし、グラフの縦軸が対数目盛となっているため、定量的な一致を見るには十分でない。そこでより詳

細な比較を行うために、微分断面積の相対的な差をその実験値と比較してみる。原子核 A と原子核 B の微分断面積の相対的な差 $D(\theta)$ は次の式で定義される。

$$D(\theta) = \frac{\left(\frac{d\sigma_A}{d\Omega}\right) - \left(\frac{d\sigma_B}{d\Omega}\right)}{\left(\frac{d\sigma_A}{d\Omega}\right) + \left(\frac{d\sigma_B}{d\Omega}\right)} \quad (5.1)$$

ただし、 $d\sigma_A/d\Omega$, $d\sigma_B/d\Omega$ は原子核 A と B の微分断面積を表す。 $D(\theta)$ のグラフは対数目盛を使わずに書けるので、微分断面積の絶対値よりも定量的な比較を行うことができる。また、実験で直接測定される微分断面積も 2 つの原子核の微分断面積の相対値であり、原子核 A と B の質量数が近い場合には、微分断面積の絶対値を測定する場合に比べて実験誤差を小さくすることができる。図 20 から図 25 に Ca, Ti と Sn についての

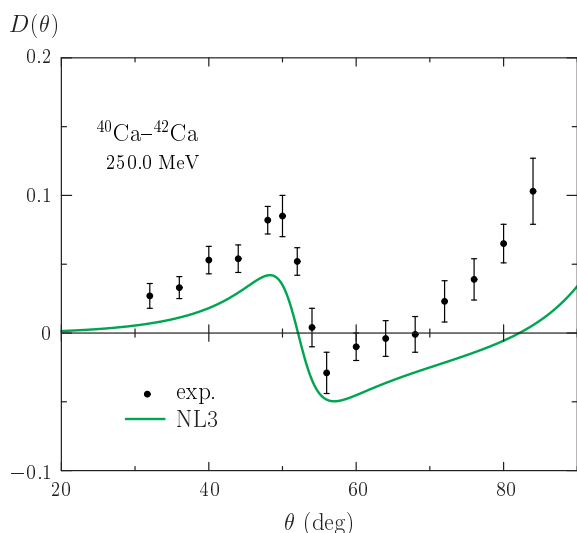


図 20 $D(\theta)$ ($^{40}\text{Ca}-^{42}\text{Ca}$, 250.0 MeV)

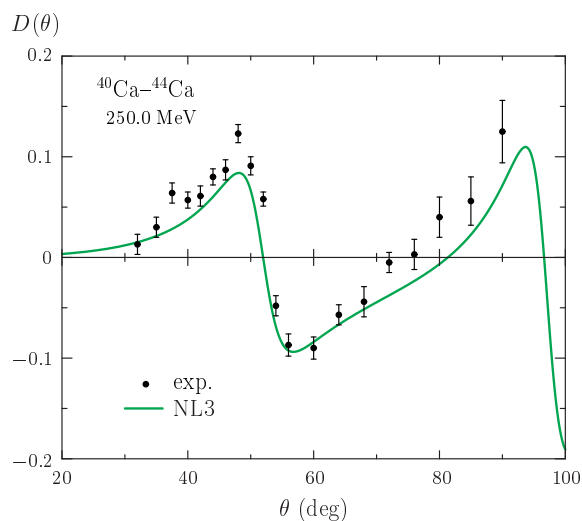


図 21 $D(\theta)$ ($^{40}\text{Ca}-^{44}\text{Ca}$, 250.0 MeV)

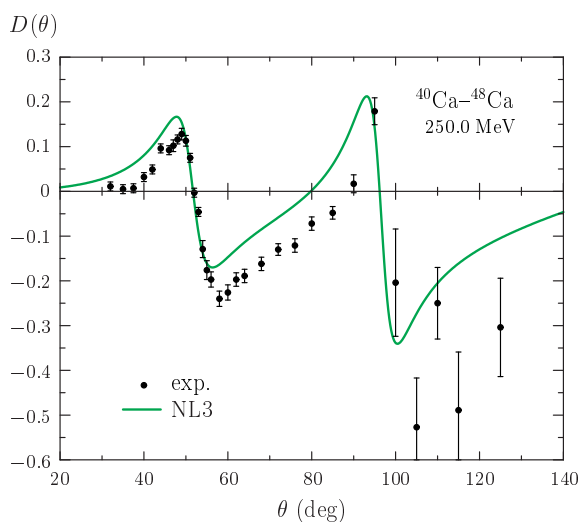


図 22 $D(\theta)$ ($^{40}\text{Ca}-^{48}\text{Ca}$, 250.0 MeV)

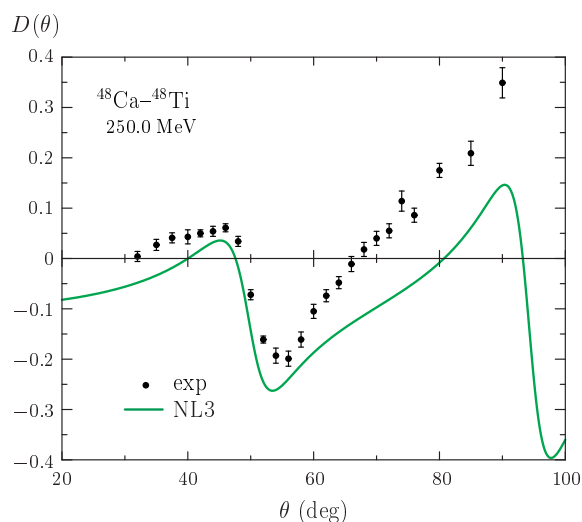


図 23 $D(\theta)$ ($^{48}\text{Ca}-^{48}\text{Ti}$, 250.0 MeV)

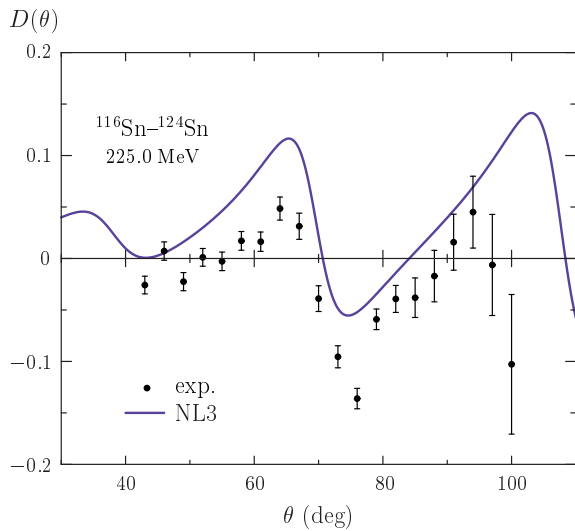


図 24 $D(\theta)$ ($^{116}\text{Sn}-^{124}\text{Sn}$, 225.0 MeV)

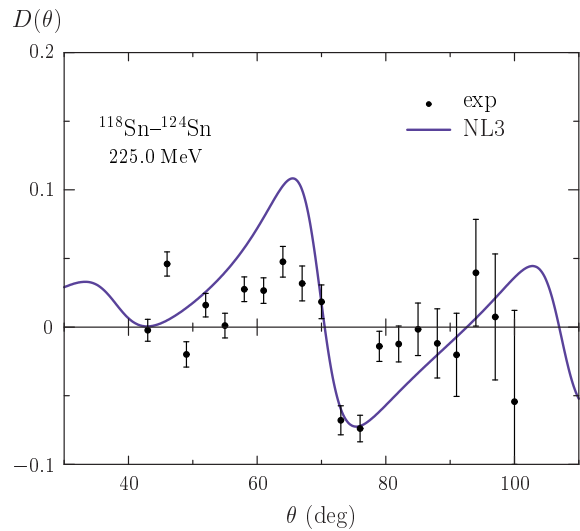


図 25 $D(\theta)$ ($^{118}\text{Sn}-^{124}\text{Sn}$, 225.0 MeV)

$D(\theta)$ のグラフを示す。これらの図の実験データは、Ca, Ti については参考文献 [14]、Sn については参考文献 [16] のものを使った。 $D(\theta)$ の計算結果と実験データを比較すると、実験と一致しているように見えていた散乱角の小さい領域においても、計算と実験が完全に合うことはない。また、微分断面積の絶対値を比較したグラフと同様に、散乱角が大きいところほど一致が悪いようである。しかし、実験データが示す $D(\theta)$ の全体的な特徴は、原子核の相対論的模型でよく表せている。

5.2 中性子数と原子核の形状

原子核の電荷分布の大部分は陽子によって決まっているが、陽子と中性子は核力によって関係し合っているから、中性子も原子核の電荷分布に何か影響を与えるはずである。ここでは、とくに中性子数を変化させたときに起こる原子核の電荷分布の変化を調べる。図 26 は、Sn の 3 つのアイソトープについて電荷分布を計算

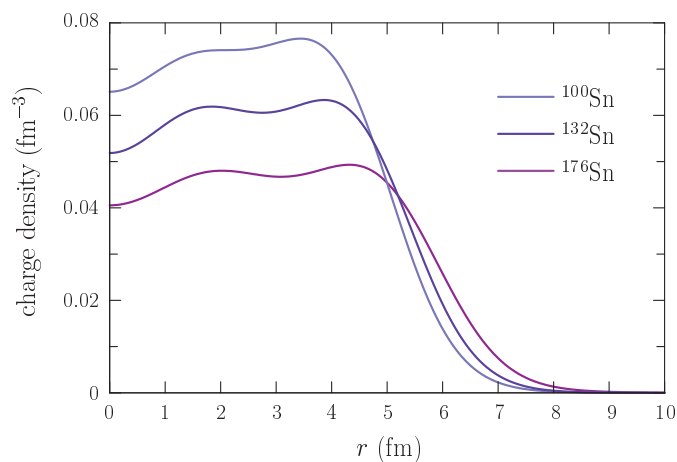


図 26 Sn のアイソトープの電荷分布

したものである。この図より、中性子数の変化によって原子核の電荷分布も変化することがわかる。中性子は電荷をもたないが、中性子の数が増えることで原子核の半径が大きくなり、それによって陽子の分布も広がって図のような電荷分布の変化が起こると考えられる。

中性子数による原子核の電荷分布の変化を定量的に調べるために、電荷分布をパラメーターによって特徴づけてその変化を見る。そのために、ヘルムモデル [17] という簡単な関数を使って原子核の電荷分布をうまく適合する。ヘルムモデルの電荷密度 $\rho_H(r)$ は、次のような 2 つのパラメーター R, σ を含む関数である。

$$\rho_H(r) = \int g(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \left[\frac{Z}{(4\pi R^3/3)} \theta(R - r') \right] d^3x' \quad (5.2)$$

ただし、 g は 3 次元空間の規格化されたガウス分布

$$g(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{3/2}} \exp\left(-\frac{\mathbf{x}^2}{2\sigma^2}\right) \quad (5.3)$$

を表し、パラメーター σ はこの中に含まれる。また、 θ はヘヴィサイドの階段関数

$$\theta(x) = \begin{cases} 0 & (x < 0) \\ 1 & (x > 0) \end{cases} \quad (5.4)$$

である。 $\rho_H(r)$ は、半径 R の球内の一様な電荷分布 (電荷 Z) とガウス分布の畳み込みになっている。したがって、 $\rho_H(r)$ をフーリエ変換したものは

$$\int \rho_H(r) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} d^3x = \frac{3Z}{4\pi R^3} \left[\int g(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} d^3x \right] \left[\int \theta(R - r) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} d^3x \right]$$

となる。一般に、規格化された原子核の電荷分布 $\rho_c(r)/Z$ のフーリエ変換を原子核の形状因子というので、ヘルムモデルの形状因子 $F_H(q)$ は

$$F_H(q) = \frac{3}{4\pi R^3} \left[\int g(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} d^3x \right] \left[\int \theta(R - r) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} d^3x \right] \quad (5.5)$$

となる ($q = |\mathbf{q}|$)。右辺の 2 つのフーリエ変換は解析的に計算できる。まずガウス分布をフーリエ変換すると

$$\int g(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} d^3x = \prod_{i=1}^3 \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{x_i^2}{2\sigma^2}} e^{-iq_i x_i} dx_i \right] = \prod_{i=1}^3 e^{-\frac{\sigma^2 q_i^2}{2}} = e^{-\frac{\sigma^2 q^2}{2}} \quad (5.6)$$

となる。また階段関数のフーリエ変換は

$$\begin{aligned} \int \theta(R - r) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} d^3x &= 2\pi \int_0^R r^2 dr \int_{-1}^1 dt e^{-iqrt} = \frac{4\pi}{q} \int_0^R r \sin qr dr \\ &= -\frac{4\pi}{q} \frac{d}{dq} \int_0^R \cos qr dr = -\frac{4\pi}{q} \frac{d}{dq} \frac{\sin Rq}{q} \end{aligned}$$

となるが、球ベッセル関数の公式

$$j_n(z) = z^n \left(-\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^n \frac{\sin z}{z} \quad (5.7)$$

で $n = 1$ としたものをを用いると

$$\int \theta(R - r) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} d^3x = \frac{4\pi R^2}{q} j_1(Rq) \quad \left(j_1(z) = \frac{\sin z - z \cos z}{z^2} \right) \quad (5.8)$$

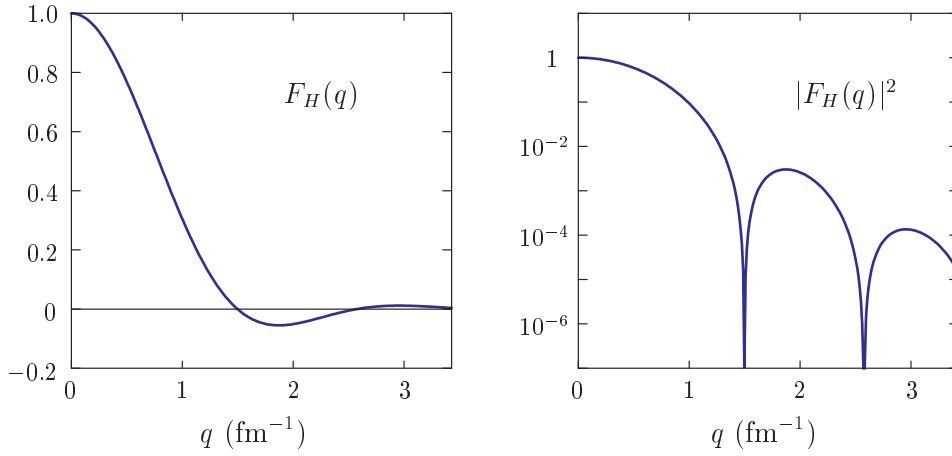


図 27 ヘルムモデルによる形状因子 ($R = 3 \text{ fm}$, $\sigma = 0.5 \text{ fm}$)

と表せる。よって、ヘルムモデルの形状因子は

$$F_H(q) = \frac{3}{Rq} j_1(Rq) e^{-\frac{\sigma^2 q^2}{2}} \quad (5.9)$$

となる。

電荷分布 $\rho_H(r)$ を表す式よりも、形状因子を表す式の方が簡単な形になっているから、パラメーター R, σ を決めるには形状因子を使った方が便利である。図 27 は 2 つのパラメーターを適当に選んだ場合の $F_H(q)$ のグラフである。右側のグラフは対数目盛を使って書いた $|F_H(q)|^2$ のグラフであるが、球ベッセル関数 j_1 が 0 になる点で $|F_H(q)|^2$ は鋭い極小を示す。このような極小部分は実際の原子核の形状因子にも現れるだろうから、その部分をヘルムモデルの極小部分にあわせることでパラメーター R, σ をうまく決めることができる。原子核の形状因子を求めるには、電荷分布のフーリエ変換を計算して、それを Z で割ればよい。電荷分布のフーリエ変換は式 (3.53) から計算できる。すなわち、核子密度などのフーリエ変換に核子の形状因子を掛ければよい。図 28 に計算で求めた原子核の形状因子を示す。赤色の曲線が NL3 による計算結果で、ヘルムモデルと同様の周期的な鋭い極小が現れる。パラメーター R は、 $F_H(q)$ の最初の極小点を $F(q)$ の最初の極小点に合わせるようにして決める。最初の極小点を選ぶのは、 q が小さいところの方が電荷分布表面付近の性質をよく表すためである。 q が大きいところでは、電荷分布中心付近の性質も影響してくるため、 $F(q)$ と $F_H(q)$ をうまく合わせられるとは限らない(図 28)。 $F_H(q)$ の極小点は、球ベッセル関数 j_1 の零点に対応しているが、 $j_1(x)$ の最初の零点は $x = 4.49341$ にあるので、 $F(q)$ の極小点が $q = q_1$ にある場合は

$$Rq_1 = 4.49341, \quad R = \frac{4.49341}{q_1} \quad (5.10)$$

から R を決める。もう 1 つのパラメーター σ を決めるには、形状因子の最初の極大値をあわせればよい。 $q = q_2$ において $F(q)$ が最初の極大値をとる場合、 $F(q_2) = F_H(q_2)$ が成り立つように

$$F(q_2) = \frac{3}{Rq_2} j_1(Rq_2) e^{-\frac{\sigma^2 q_2^2}{2}}$$

とする。これを σ について解けば

$$\sigma^2 = \frac{2}{q_2^2} \ln \left(\frac{3 j_1(Rq_2)}{Rq_2 F(q_2)} \right) \quad (5.11)$$

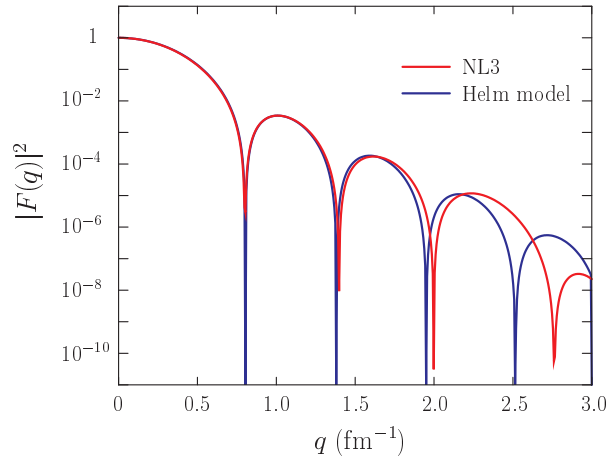


図 28 $F(q)$ と $F_H(q)$ (^{120}Sn)

となる。

図 29、図 30 は、 R, σ を合わせたときのヘルムモデルによる電荷密度 $\rho_H(r)$ である。ヘルムモデルは、もとの電荷分布の表面付近の特徴をよく表しているように見える。2つのパラメーター R, σ の物理的意味を考えると、 R は明らかに電荷分布の半径を表している。もう1つのパラメーター σ はガウス分布の中にあられるが、そのガウス分布によって $\rho_H(r)$ は一様な電荷分布からずれる。 $\rho_H(r)$ のグラフでは、電荷分布の表面が一様な分布に比べてぼやけているから、 σ は原子核表面付近のぼやけ度を表すパラメーターである。原子核表面付近の性質は、原子核の相対論的模型によってうまく表すことができるので、これを使って R, σ の値を調べれば、電荷分布の大きさや形に関するよい情報が得られるはずである。

図 31–38 は、いろいろなアイソトープについて電荷分布の半径 R_c と表面のぼやけ度 σ_c を調べたものである。横軸が中性子数 N を表し、陽子数 Z はそれぞれのグラフで固定してある。いっしょに示した R_n, σ_n は、中性子密度 ρ_n の半径と表面のぼやけ度を表し、 R_c, σ_c と同じ方法を使って求めている。ただし、電荷密度 ρ_c では核子の形状を考慮しているが、中性子密度 ρ_n に対してはそのような補正は行っていない。半径 R のグラフでは横軸の目盛が等間隔でないが、これは $N \rightarrow A^{1/3} = (Z + N)^{1/3}$ という置き換えをしたときに目盛

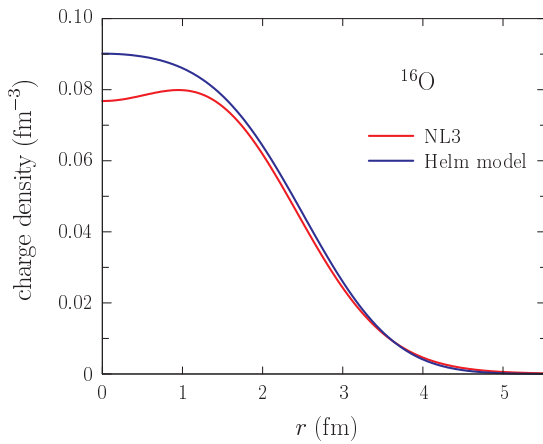


図 29 $\rho_H(r)$ ($R = 2.8 \text{ fm}, \sigma = 0.86 \text{ fm}$)

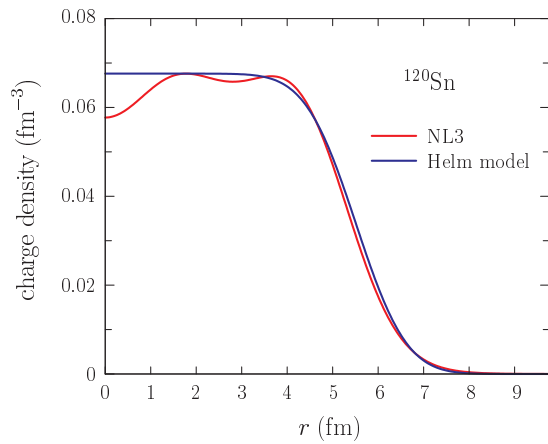


図 30 $\rho_H(r)$ ($R = 5.6 \text{ fm}, \sigma = 0.87 \text{ fm}$)

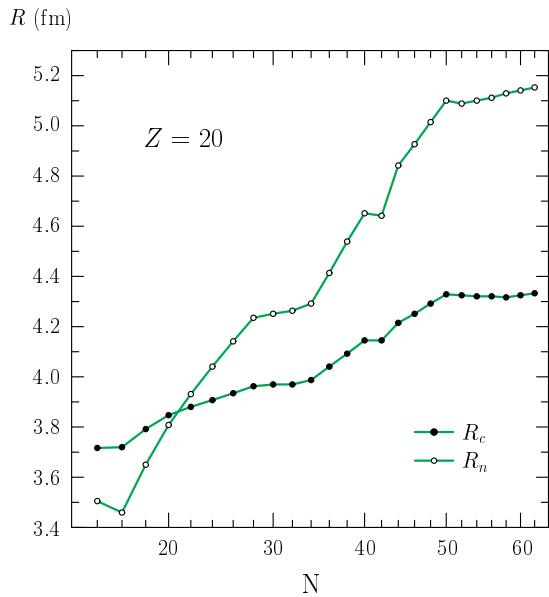


図 31 Ca の中性子数と半径 R

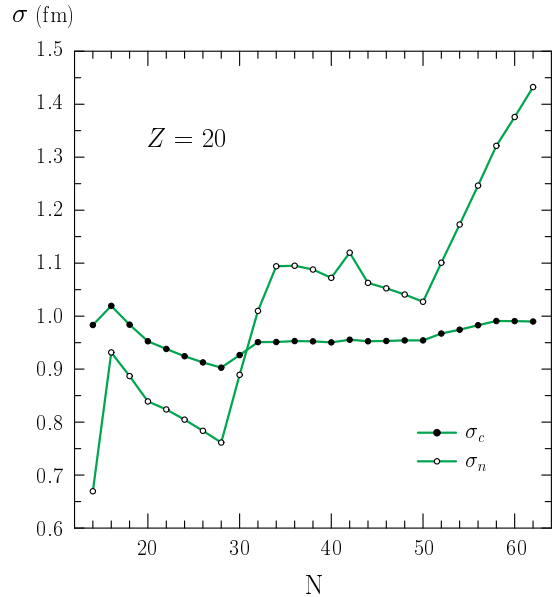


図 32 Ca の中性子数と表面の厚さ σ

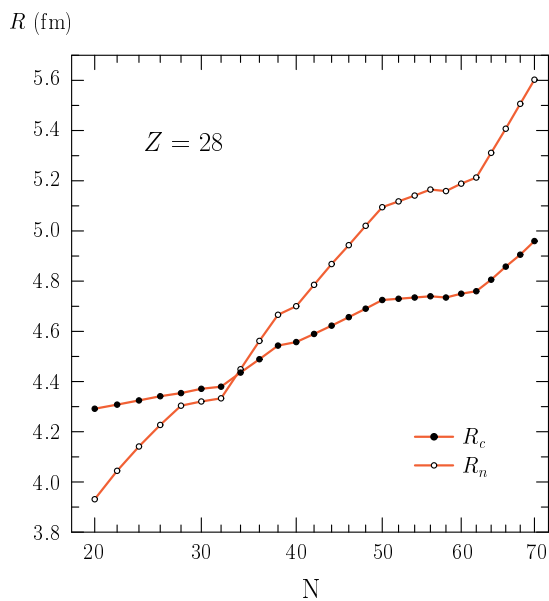


図 33 Ni の中性子数と半径 R

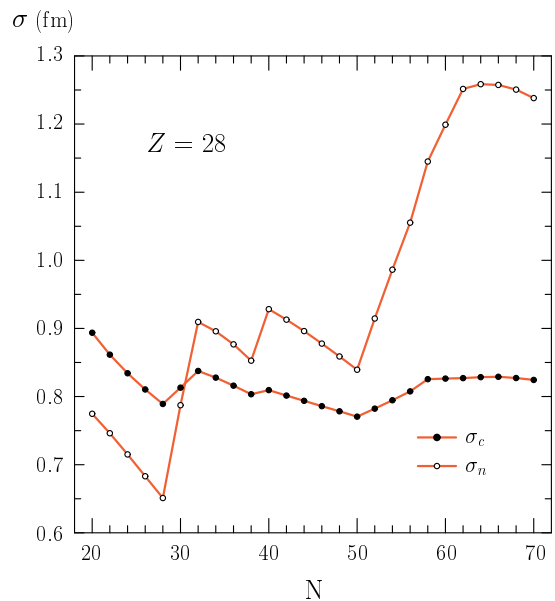


図 34 Ni の中性子数と表面の厚さ σ

が等間隔になるように調整したためである。したがって、グラフの形は $A^{\frac{1}{3}}$ と半径 R の関係を表していて、この形はほぼ直線的に増加するものになっている。直線の傾きは、 R_c のグラフよりも R_n のグラフの方が大きいから、中性子数 N を増やしていったときに、陽子よりも中性子の方が外側に広がりやすいと言える。次に、表面のぼやけ度 σ についてのグラフを見ると、まず電荷分布については σ_c がほぼ一定になっていることがわかる。 Z の値が異なる 4 つのグラフで σ_c を比較してみると、 N を変えるよりも Z を変えた方が σ_c が大きく変化するように見える。ただし、どの原子核においても σ_c の値は 0.8 fm から 1.1 fm 程度である。一方、 σ_n は σ_c に比べて大きく変化し、中性子数が増えると σ_n も大きくなるという傾向がある。ただし、こ

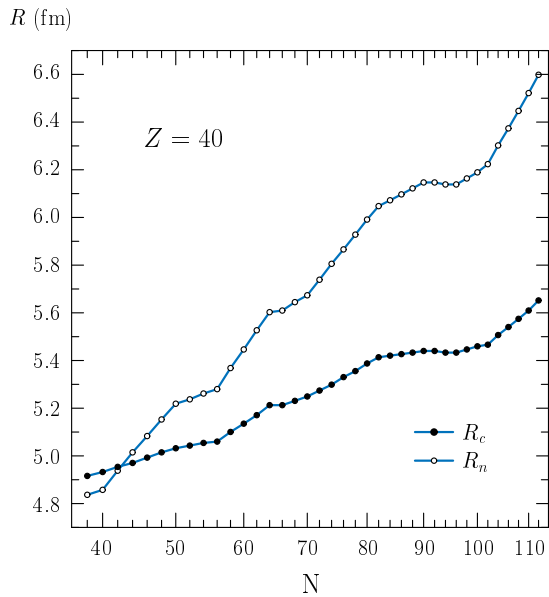


図 35 Zr の中性子数と半径 R

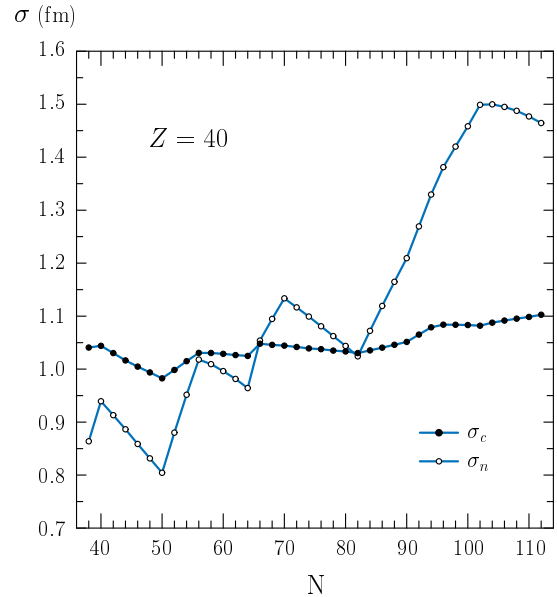


図 36 Zr の中性子数と表面の厚さ σ

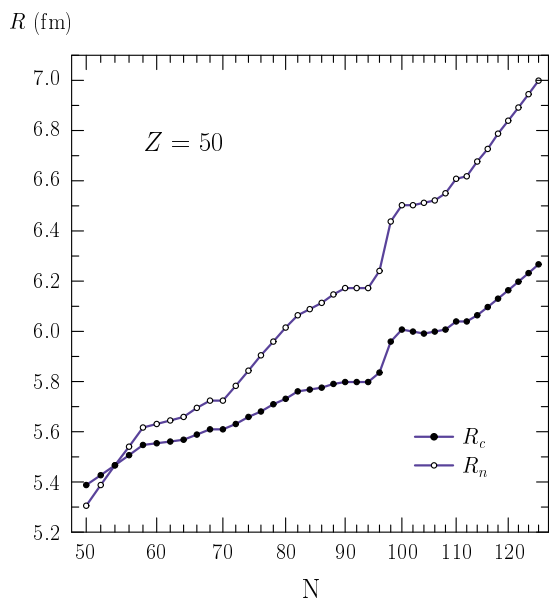


図 37 Sn の中性子数と半径 R

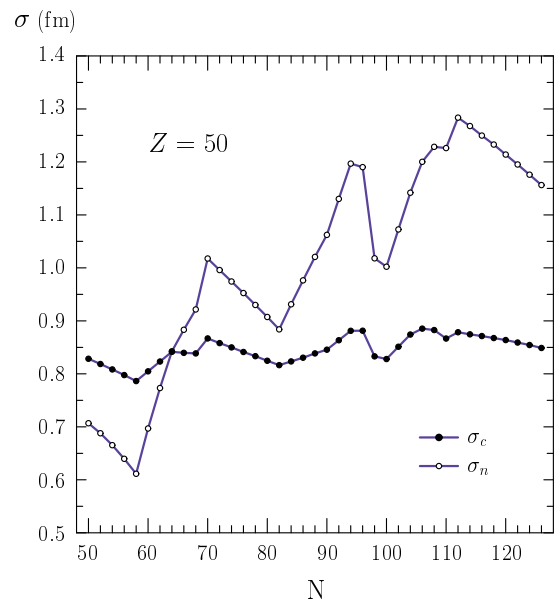


図 38 Sn の中性子数と表面の厚さ σ

の増加は半径の場合のように単調でなく、 σ_n は小さな増加・減少を繰り返す。グラフだけからではわからないが、この小さな増加と減少には規則性がある。今の計算では、中性子の数が1つ増えたとき、その中性子はそれまで占有されていなかった状態の中で最もエネルギーの低い状態に入ることになるが、その準位のエネルギーを指定する量子数 n の値によって、 σ_n の増加・減少が決まっている。新しい中性子がエネルギー最低の $n = 1$ の状態に入った場合には、 σ_n が減少するかほぼ一定になる。一方、 $n = 2, 3, \dots$ の状態に入った場合は σ_n が増加する。この規則性は角運動量を指定する量子数 κ の値によらず、図に示したほぼすべての原子核で成り立っている。また、変化は小さいが σ_c も同様のふるまいをする。最後に、半径 R と表面の厚さ σ

の関係を見てみると、表面の厚さ σ_c や σ_n が減少している場合には、 R のグラフの対応する部分で傾きが大きくなっていることがわかる。反対に σ_c, σ_n が増加する場合には、対応する R_c, R_n のグラフの傾きが小さくなる。ところで、どの図を見てもグラフの傾きがほぼ一定になっている部分があるが、このような部分には同じエネルギーをもつ縮退した状態が対応している。例えば、Sn のグラフの $N = 70$ から $N = 82$ にある直線的な部分では、Sn の 71 個目から 82 個目までの 12 個の中性子がすべて $1h_{11/2}$ 状態に入る。図に示した原子核では、ほとんどすべてに対してこの規則性が成り立っている。しかし例外もある。この例外は Sn のグラフの $N = 94$ から $N = 100$ にある半径が急に大きくなる部分で起こる。まず $N = 90$ では、いっぱいになった $2f_{7/2}$ とそれよりエネルギーの低い状態に 90 個の中性子が入っている。その上には、ほぼ縮退した空の準位 $3p_{3/2}$ と $1h_{9/2}$ があり、この時点では $3p_{3/2}$ の方が少しエネルギーが低い。そのため、 $N = 94$ とした場合、91 個目から 94 個目までの 4 つの中性子は $3p_{3/2}$ に入ることになる。そして $N = 96$ では、残りの 2 つの中性子がその上の $1h_{9/2}$ に入る。しかし $N = 98$ で変化が起こる。 $N = 98$ では、 $3p_{3/2}$ よりも $1h_{9/2}$ の方がエネルギーが小さい。そのため、91 個目から 98 個目までの 8 個の中性子はすべて $1h_{9/2}$ に入り、今まで満たされていた $3p_{3/2}$ は空になる。 R と σ はこの部分で最も大きく変化する。その後 $N = 100$ で $1h_{9/2}$ がいっぱいになり、 $N = 104$ では 101 個目から 104 個目までの 4 つの中性子が $3p_{3/2}$ に入る。ただし、実際の原子核では $3p_{3/2}$ だけに中性子が入ったり、 $1h_{9/2}$ だけに中性子が入るということは起こらず、これらの重ね合わせが実現するはずだから、実際の R, σ の変化はもつとなめらかになるはずである。

6 まとめと今後の課題

本論文では、原子核の電荷分布と電子-原子核弾性散乱の微分断面積をどちらも相対論的な方程式から求め、その結果と実験データの比較を行った。原子核の電荷分布の計算では、まず最初に核子の密度分布を求めた。核子密度の計算には、原子核の電荷分布をうまく求められる原子核の相対論的模型を使い、ローレンツ変換のもとで不変なラグランジアンから原子核の場の方程式を導いた。ただし、場の方程式を直接解くことは難しいので、平均場近似などいくつかの近似を使い球対称な密度分布を求めた。次に、核子の密度分布から原子核の電荷分布を計算した。核子の広がりや異常磁気モーメントは、核子の形状因子を使って取り入れた。そのあとの電子-原子核弾性散乱の解析では、まず原子核の電荷分布を用いて電子のポテンシャルを求めた。そして、このポテンシャルを使って動径方向のディラック方程式を解き、部分波の位相のずれを求めた。電子散乱の微分断面積は、この位相のずれを使って計算した。最後に、計算結果を微分断面積の実験データと比較し、理論と実験がよく一致することを見た。また、不安定核を含むいろいろな原子核についてその電荷分布を求め、中性子数と原子核の大きさの関係を調べた。まもなく不安定核を使った電子散乱の実験が本格的に行えるようになるので [18]、理論的に求めた不安定核の電荷分布と実験データを比較することで、不安定核領域における理論の正しさを検証できるようになる。

以上のような方法では、電子散乱の微分断面積をある程度よく再現できるが、理論と実験が完全に一致するわけではない。一致をよくするための方法として、まず原子核のモデルを改良することが考えられる。また、原子核の電荷分布の計算では核子の形状因子以外の補正を取り入れる必要がある。さらに、以上の方法では球対称な原子核しか扱えないので、原子核の変形も記述できるようにしなければならない。ほかにも対相互作用を取り入れるようにしたい。

A 付録

A.1 ディラック方程式の変形

式 (2.35) のディラック方程式

$$\left[-i\hbar\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla + V_0 + \beta(Mc^2 - V_s)\right]\psi = E\psi \quad (\text{A.1})$$

を ψ の上 2 成分、または下 2 成分に対する方程式に変形する。式 (A.1) を上 2 成分と下 2 成分に分けて書くと

$$\begin{bmatrix} V_0 + Mc^2 - V_s & -i\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla \\ -i\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla & V_0 - Mc^2 + V_s \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi \\ \chi \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \varphi \\ \chi \end{bmatrix} \quad (\text{A.2})$$

または

$$-i\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\varphi = (E - V_0 + Mc^2 - V_s)\chi \quad (\text{A.3})$$

$$-i\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\chi = (E - V_0 - Mc^2 + V_s)\varphi \quad (\text{A.4})$$

となる。

まず ψ の下 2 成分 χ を消去して、上 2 成分 φ が満たす方程式を求める。 U を

$$U = E - V_0 + Mc^2 - V_s \quad (\text{A.5})$$

と置くと、(A.3) より

$$\chi = -i\hbar U^{-1}\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\varphi \quad (\text{A.6})$$

であるから、これを (A.4) に代入すると φ が満たす微分方程式は

$$-c^2\hbar^2\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla U^{-1}\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\varphi = (E - V_0 - Mc^2 + V_s)\varphi \quad (\text{A.7})$$

となる。一般に、パウリ行列 $\boldsymbol{\sigma}$ と可換な演算子 \mathbf{A}, \mathbf{B} に対して

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{A}\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B} = \sum_{i,j=1}^3 \sigma_i A_i \sigma_j B_j = \sum_{i,j=1}^3 \left(\delta_{ij} + i \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ijk} \sigma_k \right) A_i B_j = \mathbf{A}\cdot\mathbf{B} + i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\mathbf{A}\times\mathbf{B}) \quad (\text{A.8})$$

が成り立つから、 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla U^{-1}\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla$ は

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla U^{-1}\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla &= U^{-1}\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla + \boldsymbol{\sigma}\cdot(\nabla U^{-1})\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla \\ &= U^{-1}\nabla^2 + (\nabla U^{-1})\cdot\nabla + i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\nabla U^{-1})\times\nabla \\ &= \nabla\cdot U^{-1}\nabla + i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\nabla U^{-1})\times\nabla \end{aligned}$$

となる。これより (A.7) は

$$-c^2\hbar^2 [\nabla\cdot U^{-1}\nabla + i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\nabla U^{-1})\times\nabla] \varphi = (E - V_0 - Mc^2 + V_s)\varphi \quad (\text{A.9})$$

と書ける。この式の

$$\nabla\cdot U^{-1}\nabla\varphi = U^{-1}\nabla^2\varphi + (\nabla U^{-1})\cdot\nabla\varphi \quad (\text{A.10})$$

の部分には φ の一階微分 $\nabla\varphi$ があらわれるが、 φ に適当な変換 $\varphi = Y\varphi_0$ を行くと、この一階微分は消すことができる。このような関数 Y を求めるために、 $\varphi = Y\varphi_0$ を (A.10) に代入すると

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot U^{-1}\nabla\varphi &= \nabla \cdot U^{-1}\nabla Y\varphi_0 \\
&= \nabla \cdot \left(U^{-1}Y\nabla\varphi_0 + U^{-1}(\nabla Y)\varphi_0 \right) \\
&= U^{-1}Y\nabla^2\varphi_0 + \nabla(U^{-1}Y) \cdot \nabla\varphi_0 + U^{-1}(\nabla Y) \cdot \nabla\varphi_0 + \nabla \cdot (U^{-1}\nabla Y)\varphi_0 \\
&= U^{-1}Y\nabla^2\varphi_0 + \left(2U^{-1}(\nabla Y) + (\nabla U^{-1})Y \right) \cdot \nabla\varphi_0 + \nabla \cdot (U^{-1}\nabla Y)\varphi_0
\end{aligned} \tag{A.11}$$

となる。したがって、一階微分 $\nabla\varphi_0$ が消えるためには

$$2U^{-1}(\nabla Y) + (\nabla U^{-1})Y = 0 \tag{A.12}$$

となればよい。この式は次と同値である。

$$2XdY + YdX = 0 \quad (X = U^{-1})$$

これより Y は微分方程式

$$\frac{dY}{dX} = -\frac{1}{2X}Y$$

を満足するから、これを解くことで

$$Y = AX^{-\frac{1}{2}} = AU^{\frac{1}{2}}, \quad \varphi = AU^{\frac{1}{2}}\varphi_0 \tag{A.13}$$

が求まる。この Y を使うと (A.11) は次のようになる。

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot U^{-1}\nabla\varphi &= U^{-1}Y\nabla^2\varphi_0 + \nabla \cdot (U^{-1}\nabla Y)\varphi_0 \\
&= AU^{-\frac{1}{2}}\nabla^2\varphi_0 + A\nabla \cdot (U^{-1}\nabla U^{\frac{1}{2}})\varphi_0 \\
&= AU^{-\frac{1}{2}}\nabla^2\varphi_0 + A\nabla \cdot \left(\frac{1}{2}U^{-\frac{3}{2}}\nabla U \right)\varphi_0 \\
&= AU^{-\frac{1}{2}}\nabla^2\varphi_0 + A \left(\frac{1}{2}U^{-\frac{3}{2}}(\nabla^2 U) - \frac{3}{4}U^{-\frac{5}{2}}(\nabla U)^2 \right)\varphi_0
\end{aligned} \tag{A.14}$$

また、(A.9) の左辺第 2 項 $(\nabla U^{-1}) \times \nabla\varphi$ を φ_0 で表すと

$$\begin{aligned}
(\nabla U^{-1}) \times \nabla\varphi &= (\nabla U^{-1}) \times \nabla AU^{\frac{1}{2}}\varphi_0 \\
&= -U^{-2}(\nabla U) \times \left(AU^{\frac{1}{2}}\nabla\varphi_0 + \frac{1}{2}AU^{-\frac{1}{2}}(\nabla U)\varphi_0 \right) \\
&= -AU^{-\frac{3}{2}}(\nabla U) \times \nabla\varphi_0
\end{aligned} \tag{A.15}$$

となる。以上の (A.13)–(A.15) を (A.9) に代入すると、 φ_0 についての微分方程式

$$\begin{aligned}
-c^2\hbar^2 \left[U^{-\frac{1}{2}}\nabla^2 + \frac{1}{2}U^{-\frac{3}{2}}(\nabla^2 U) - \frac{3}{4}U^{-\frac{5}{2}}(\nabla U)^2 - i\boldsymbol{\sigma} \cdot U^{-\frac{3}{2}}(\nabla U) \times \nabla \right] \varphi_0 \\
= (E - V_0 - Mc^2 + V_s)U^{\frac{1}{2}}\varphi_0
\end{aligned}$$

が得られる。これを整理すると

$$\begin{aligned}
-c^2\hbar^2 \left[\nabla^2 + \frac{1}{2}U^{-1}(\nabla^2 U) - \frac{3}{4}U^{-2}(\nabla U)^2 - i\boldsymbol{\sigma} \cdot U^{-1}(\nabla U) \times \nabla \right] \varphi_0 \\
= [(E - V_0)^2 - (Mc^2 - V_s)^2] \varphi_0
\end{aligned} \tag{A.16}$$

となる。

中心力 $V_0 = V_0(r)$, $V_s = V_s(r)$ の場合には、 $U = U(r)$ より

$$-i\boldsymbol{\sigma} \cdot U^{-1}(\nabla U) \times \nabla = -i\boldsymbol{\sigma} \cdot U^{-1} \frac{dU}{dr} \frac{\boldsymbol{x}}{r} \times \nabla = \frac{1}{rU} \frac{dU}{dr} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\ell} \quad (\boldsymbol{\ell} = -i\boldsymbol{x} \times \nabla) \quad (\text{A.17})$$

であるから、(A.16) は

$$-c^2 \hbar^2 \left[\nabla^2 + \frac{1}{2U} \left(\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{dU}{dr} \right) - \frac{3}{4U^2} \left(\frac{dU}{dr} \right)^2 + \frac{1}{rU} \frac{dU}{dr} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\ell} \right] \varphi_0 = \left[(E - V_0)^2 - (Mc^2 - V_s)^2 \right] \varphi_0 \quad (\text{A.18})$$

となる。この微分方程式は、両辺を $2Mc^2$ で割って整理するとシュレーディンガー方程式と同じ形になる。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + V_c + V_{so} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\ell} \right] \varphi_0 = \frac{E^2 - M^2 c^4}{2Mc^2} \varphi_0 \quad (\text{A.19})$$

ただし

$$\varphi = \left(\frac{U}{2E} \right)^{\frac{1}{2}} \varphi_0 = \left(\frac{E - V_0 + Mc^2 - V_s}{2E} \right)^{\frac{1}{2}} \varphi_0 \quad (\text{A.20})$$

$$V_c = \frac{E}{Mc^2} V_0 - V_s - \frac{V_0^2 - V_s^2}{2Mc^2} + V_D \quad (\text{A.21})$$

$$V_D = -\frac{\hbar^2}{2M} \left[\frac{1}{2U} \left(\frac{d^2 U}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dU}{dr} \right) - \frac{3}{4U^2} \left(\frac{dU}{dr} \right)^2 \right] \quad (\text{A.22})$$

$$V_{so} = -\frac{\hbar^2}{2MrU} \frac{dU}{dr} \quad (\text{A.23})$$

波動関数の下 2 成分が満たす微分方程式は、以上の結果を使って簡単に求められる。ディラック方程式 (A.3), (A.4) は、 $(Mc^2 - V_s) \rightarrow -(Mc^2 - V_s)$ という置き換えをすると φ, χ の関係が入れ替わる。そのため、この置き換えをした場合には、以上の計算で $\varphi \rightarrow \chi$ とした式が成り立つ。したがって、以上の結果で $\varphi \rightarrow \chi$ としたあと、 $-(Mc^2 - V_s) \rightarrow (Mc^2 - V_s)$ を行えば χ の満たす微分方程式が得られる。例えば、(A.16) に対応する微分方程式は

$$\begin{aligned} -c^2 \hbar^2 \left[\nabla^2 + \frac{1}{2} \tilde{U}^{-1} (\nabla^2 \tilde{U}) - \frac{3}{4} \tilde{U}^{-2} (\nabla \tilde{U})^2 - i\boldsymbol{\sigma} \cdot \tilde{U}^{-1} (\nabla \tilde{U}) \times \nabla \right] \chi_0 \\ = \left[(E - V_0)^2 - (Mc^2 - V_s)^2 \right] \chi_0 \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

$$\tilde{U} = E - V_0 - Mc^2 + V_s \quad (\text{A.25})$$

$$\chi = \left(\frac{\tilde{U}}{2E} \right)^{\frac{1}{2}} \chi_0 = \left(\frac{E - V_0 - Mc^2 + V_s}{2E} \right)^{\frac{1}{2}} \chi_0 \quad (\text{A.26})$$

である。ただし、 φ が求まっている場合には (A.3) から χ の形も決まってしまう。

$$\chi = -i \frac{c\hbar}{E - V_0 + Mc^2 - V_s} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \varphi \quad (\text{A.27})$$

A.2 電子散乱の入射波

クーロン力のある電子散乱では、入射電子の波動関数は平面波 $e^{ikz}\chi$ にならない。ここでは入射電子の波動関数を正確に求める。

入射電子の波動関数の上 2 成分 φ_A は、 $r \rightarrow \infty$ で式 (4.104) のようになる。

$$\varphi_A = \frac{e^{i(kr - \nu \ln 2kr)}}{r} \sum_{\ell=0}^{\infty} \left(\frac{2\ell+1}{2ik} P_{\ell}(\cos \theta) \right) \chi - \frac{e^{-i(kr - \nu \ln 2kr)}}{r} \sum_{\ell=0}^{\infty} \left(\frac{(-1)^{\ell}(2\ell+1)}{2ik} P_{\ell}(\cos \theta) \right) \chi \quad (\text{A.28})$$

この式は平面波の動径部分をうまく修正して導いたものであった。そのとき、平面波の角度部分には何も変更を加えなかったが、クーロン力があれば波動関数の角度依存性やスピン依存性も変わるはずである。しかし $r \rightarrow \infty$ を考えると、入射波の角度依存性として (A.28) 以外のものは考えにくくなる。これを見るために、まず次の式を証明する。

$$\delta(x-1) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4} P_{\ell}(x) \quad (\text{A.29})$$

この式は、 $\delta(x-1)$ がルジャンドル多項式によって展開されると仮定して

$$\delta(x-1) = \sum_{\ell=0}^{\infty} d_{\ell} P_{\ell}(x)$$

と置き、展開係数 d_{ℓ} を決めることで示せる。ルジャンドル多項式の直交性

$$\int_{-1}^1 P_{\ell}(x) P_{\ell'}(x) dx = \frac{2}{2\ell+1} \delta_{\ell\ell'} \quad (\text{A.30})$$

と $P_{\ell}(1) = 1$ を使うと

$$\frac{2}{2\ell+1} d_{\ell} = \int_{-1}^1 \delta(x-1) P_{\ell}(x) dx = \frac{1}{2} P_{\ell}(1) = \frac{1}{2} \quad (\text{A.31})$$

となる。デルタ関数を積分したところで定数 $1/2$ がついたが、これはデルタ関数の発散点が積分区間の境界にあるためである。この性質は次の式から理解できる。

$$\int_0^{\infty} \delta(x) dx = \frac{1}{2} \left(\int_0^{\infty} \delta(x) dx + \int_0^{\infty} \delta(-x) dx \right) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = \frac{1}{2} \quad (\text{A.32})$$

同様の計算を行うと次の式も証明できる。

$$\delta(x+1) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (-1)^{\ell} \frac{2\ell+1}{4} P_{\ell}(x) \quad (\text{A.33})$$

この式を証明するためには、 $P_{\ell}(-1)$ の値が必要になるが、ルジャンドル多項式は偶関数または奇関数なので、 $P_{\ell}(1) = 1$ より $P_{\ell}(-1) = (-1)^{\ell}$ である。式 (A.29), (A.33) を使うと (A.28) の無限和が計算できる。

$$\varphi_A = 2\delta(1 - \cos \theta) \frac{e^{i(kr - \nu \ln 2kr)}}{ikr} \chi - 2\delta(1 + \cos \theta) \frac{e^{-i(kr - \nu \ln 2kr)}}{ikr} \chi \quad (r \rightarrow \infty) \quad (\text{A.34})$$

入射波としては、 $\theta = \pi$ の方向から $\theta = 0$ の方向へ進んでいく波を考えているが、この式の第 2 項は $\theta = \pi$ の無限遠から原点の方へやってくる波、第 1 項は原点から $\theta = 0$ の方向へ進んでいく波を表している。そして $\theta = 0, \pi$ 以外の方向に入射波はない。よって、 $r \rightarrow \infty$ では波動関数の角度依存性を修正する余地はない。

次に入射波 φ_A の正確な形を求める。今考えたいのは原点から十分離れた点における入射波の形なので、ポテンシャルは

$$V(r) = -\frac{Z\alpha\hbar}{r} \quad (\text{A.35})$$

としてよい。このポテンシャルと境界条件 (A.28) によってディラック方程式を解けば入射波を求められるが、これを直接解くことは難しいので、部分波で展開した形の形式的な解を求めることにする。点電荷の場合、部分波の上2成分は式 (4.48) や (4.51) で与えられる。これらを使って入射波 φ_A を表すと

$$\varphi_A = \sum_{\kappa m} \left(a_{\kappa m} \frac{f_\kappa(r)}{r} \mathcal{Y}_{\kappa m}(\hat{\boldsymbol{x}}) + b_{\kappa m} \frac{\tilde{f}_\kappa(r)}{r} \mathcal{Y}_{\kappa m}(\hat{\boldsymbol{x}}) \right) \quad (\text{A.36})$$

となる。展開係数 $a_{\kappa m}, b_{\kappa m}$ は (A.28) の境界条件

$$\varphi_A \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{e^{i(kr - \nu \ln 2kr)}}{r} \sum_{\kappa m} \left(p_{\kappa m} \frac{2\ell + 1}{2ik} \mathcal{Y}_{\kappa m} \right) - \frac{e^{-i(kr - \nu \ln 2kr)}}{r} \sum_{\kappa m} \left(p_{\kappa m} \frac{(-1)^\ell (2\ell + 1)}{2ik} \mathcal{Y}_{\kappa m} \right) \quad (\text{A.37})$$

から決められる。 $P_\ell(\cos\theta)\chi$ は球面調和スピノールで展開してある。 $f_\kappa, \tilde{f}_\kappa$ の $r \rightarrow \infty$ における漸近形は、式 (4.53), (4.54) のようになることがわかっているから、(A.36) で $r \rightarrow \infty$ とすると

$$\begin{aligned} \varphi_A \xrightarrow{r \rightarrow \infty} & \sum_{\kappa m} \left(a_{\kappa m} \frac{\sin(kr - \nu \ln 2kr - \pi\ell/2 + \eta_\kappa)}{r} \mathcal{Y}_{\kappa m} + b_{\kappa m} \frac{\sin(kr - \nu \ln 2kr - \pi\ell/2 + \tilde{\eta}_\kappa)}{r} \mathcal{Y}_{\kappa m} \right) \\ & = \frac{e^{i(kr - \nu \ln 2kr)}}{r} \sum_{\kappa m} \left(a_{\kappa m} \frac{(-i)^\ell e^{i\eta_\kappa}}{2i} + b_{\kappa m} \frac{(-i)^\ell e^{i\tilde{\eta}_\kappa}}{2i} \right) \mathcal{Y}_{\kappa m} \\ & \quad - \frac{e^{-i(kr - \nu \ln 2kr)}}{r} \sum_{\kappa m} \left(a_{\kappa m} \frac{i^\ell e^{-i\eta_\kappa}}{2i} + b_{\kappa m} \frac{i^\ell e^{-i\tilde{\eta}_\kappa}}{2i} \right) \mathcal{Y}_{\kappa m} \quad (\text{A.38}) \end{aligned}$$

となる。式 (A.37) と (A.38) は同じになるはずだから

$$\begin{aligned} \frac{(-i)^\ell e^{i\eta_\kappa}}{2i} a_{\kappa m} + \frac{(-i)^\ell e^{i\tilde{\eta}_\kappa}}{2i} b_{\kappa m} &= \frac{2\ell + 1}{2ik} p_{\kappa m} \\ \frac{i^\ell e^{-i\eta_\kappa}}{2i} a_{\kappa m} + \frac{i^\ell e^{-i\tilde{\eta}_\kappa}}{2i} b_{\kappa m} &= \frac{(-1)^\ell (2\ell + 1)}{2ik} p_{\kappa m} \end{aligned}$$

である。これを $a_{\kappa m}, b_{\kappa m}$ について解くと

$$a_{\kappa m} = \frac{(2\ell + 1) i^\ell}{k} \frac{-\sin \tilde{\eta}_\kappa}{\sin(\eta_\kappa - \tilde{\eta}_\kappa)} p_{\kappa m}, \quad b_{\kappa m} = \frac{(2\ell + 1) i^\ell}{k} \frac{\sin \eta_\kappa}{\sin(\eta_\kappa - \tilde{\eta}_\kappa)} p_{\kappa m} \quad (\text{A.39})$$

となる。よって、入射波の上2成分 φ_A は

$$\varphi_A = \sum_{\kappa m} (2\ell + 1) i^\ell \frac{\sin \eta_\kappa \tilde{f}_\kappa(r) - \sin \tilde{\eta}_\kappa f_\kappa(r)}{\sin(\eta_\kappa - \tilde{\eta}_\kappa) kr} p_{\kappa m} \mathcal{Y}_{\kappa m}(\hat{\boldsymbol{x}}) \quad (\text{A.40})$$

と表せる。展開係数 $a_{\kappa m}, b_{\kappa m}$ は ψ の4成分に掛かるものだから、入射波の下2成分 φ'_A もすぐに求まる。

$$\begin{aligned} \varphi'_A &= \sum_{\kappa m} \left(a_{\kappa m} \frac{ig_\kappa(r)}{r} \mathcal{Y}_{-\kappa m}(\hat{\boldsymbol{x}}) + b_{\kappa m} \frac{i\tilde{g}_\kappa(r)}{r} \mathcal{Y}_{-\kappa m}(\hat{\boldsymbol{x}}) \right) \\ &= \sum_{\kappa m} (2\ell + 1) i^{\ell+1} \frac{\sin \eta_\kappa \tilde{g}_\kappa(r) - \sin \tilde{\eta}_\kappa g_\kappa(r)}{\sin(\eta_\kappa - \tilde{\eta}_\kappa) kr} p_{\kappa m} \mathcal{Y}_{-\kappa m}(\hat{\boldsymbol{x}}) \quad (\text{A.41}) \end{aligned}$$

A.3 ガンマ関数の計算方法

電子散乱の微分断面積を求めるためには部分波の位相のずれ δ_κ が必要になる。この位相のずれを計算するときに解析的に求まる点電荷の散乱波を使うが、この散乱波には式 (4.46) や (4.50) のようなガンマ関数の偏角が含まれている。ここでは $\Gamma(z)$ を数値積分によって求める方法について述べる。

積分によるガンマ関数の定義は

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty s^{z-1} e^{-s} ds \quad (\text{A.42})$$

である。この積分は $x = \text{Re } z > 0$ で広義一様に収束する。 z が複素数なので、被積分関数の中のべき関数は多価関数になるが、積分路上で $\text{Arg } s = 0$ と定義されているためガンマ関数は一価である。つまり

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty e^{(z-1)\text{Log } s} e^{-s} ds = \int_0^\infty e^{(z-1)\ln s} e^{-s} ds \quad (\text{A.43})$$

となる。この式を数値積分に使ってもよいが、変数変換 $s = e^t$ を行って

$$\Gamma(z) = \int_{-\infty}^\infty e^{(z-1)t} \exp(-e^t) e^t dt = \int_{-\infty}^\infty \exp(zt - e^t) dt \quad (\text{A.44})$$

とした方が計算の精度がよくなる。数値計算では無限区間を扱えないので、適当な有限区間で計算を行うことになるが、積分区間は次のようにして決める。まず被積分関数の絶対値を $g(t)$ と置くと

$$g(t) = |\exp((x + iy)t - e^t)| = \exp(xt - e^t) \quad (\text{A.45})$$

となる。 $g(t)$ を微分すると

$$g'(t) = (x - e^t) \exp(xt - e^t) \quad (\text{A.46})$$

となるので、 $x > 0$ より、 $g(t)$ は $t = \ln x$ で最大値をとり、 $t < \ln x$ では指数関数的に単調減少、 $t > \ln x$ では二重指数関数的に単調減少である。したがって、積分区間の端点を a とすると ($a < \ln x$ または $a > \ln x$)

$$\frac{g(a)}{g(\ln x)} = 10^{-m} \quad (\text{A.47})$$

を満たすように a を選べばよい。 m は 20 くらいにとれば十分である。式 (A.47) の両辺の対数をとると

$$(xa - e^a) - (x \ln x - x) = -m \ln 10 \quad (\text{A.48})$$

という方程式が得られるから、これを a について解けば 2 つの端点が決まる。この積分区間を 100 等分くらいに分けて台形則を使えば 12~15 桁くらいの精度で $\Gamma(z)$ を計算できる。

$x = \text{Re } z \leq 0$ のときには上の積分が収束しないが、この場合は n を自然数として $\Gamma(z+n)$ や $\Gamma(1-z)$ が計算できる。そこで、まずこれを計算してからガンマ関数の公式

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z), \quad \Gamma(z)\Gamma(1-z) = \frac{\pi}{\sin \pi z} \quad (\text{A.49})$$

を使って $\Gamma(z)$ を求める。また $x = \text{Re } z > 0$ であっても、 $x \approx 0$ の場合には積分区間が大きくなって計算の精度が悪くなるので、 $0 < x < 1$ の場合も上の公式を使って計算するようにする。

参考文献

- [1] B. D. Serot and J. D. Walecka, *Adv. Nucl. Phys.* **16**, 1 (1986).
- [2] J. D. Bjorken and S. D. Drell, *Relativistic Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, 1964).
- [3] A. R. Edmonds, *Angular Momentum in Quantum Mechanics* (Princeton Univ. Press, 1960).
- [4] P.-G. Reinhard, M. Rufa, J. Maruhn, W. Greiner, and J. Friedrich, *Z. Phys. A* **323**, 13 (1986).
- [5] P.-G. Reinhard, *Z. Phys. A* **329**, 257 (1988).
- [6] G. A. Lalazissis, J. König, and P. Ring, *Phys. Rev. C* **55**, 540 (1997).
- [7] J. L. Friar and J. W. Negele, *Adv. Nucl. Phys.* **8**, 219 (1975).
- [8] W. Greiner and J. Reinhardt, *Quantum Electrodynamics* (Springer-Verlag, 1992).
- [9] H. Kurasawa and T. Suzuki, *Phys. Rev. C* **62**, 054303 (2000).
- [10] X. Roca-Maza, M. Centelles, F. Salvat, and X. Viñas, *Phys. Rev. C* **78**, 044332 (2008).
- [11] D. R. Yennie, D. G. Ravenhall, and R. N. Wilson, *Phys. Rev.* **95**, 500 (1954).
- [12] 西本 敏彦 超幾何・合流型超幾何微分方程式 (共立出版, 1998).
- [13] J. L. Friar and J. W. Negele, *Nucl. Phys.* **A212**, 93 (1973).
- [14] R. F. Frosch, R. Hofstadter, J. S. McCarthy, G. K. Nöldeke, K. J. van Oostrum, B. C. Clark, R. Herman and D. G. Ravenhall, *Phys. Rev.* **174**, 1380 (1968).
- [15] Phan Xuan Ho, J.-B. Bellicard, A. Bussiere, Ph. Leconte and M. Priou, *Nucl. Phys.* **A179**, 529 (1972).
- [16] A. S. Lotvinenko, N. G. Shevchenko, A. Yu. Buki, G. A. Savitsky, V. M. Khvastunov, A. A. Khomich, V. N. Polishchuk and I. I. Chakalov, *Nucl. Phys.* **A182**, 265 (1972).
- [17] R. H. Helm, *Phys. Rev.* **104**, 1466 (1956).
- [18] T. Suda and M. Wakasugi, *Prog. Part. Nucl. Phys.* **55**, 417 (2005).