

ラザフォード散乱 (Rutherford Scattering)

—量子力学的導出—

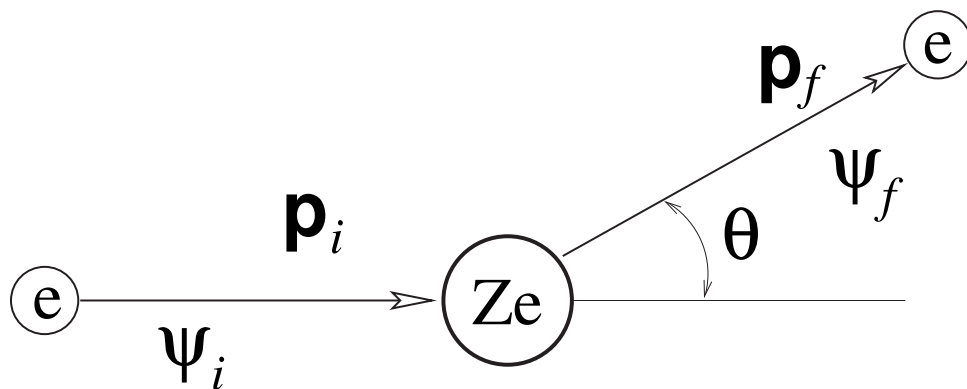


図1 Rutherford scattering の概要

1 仮定

Rutherford Scattering に於ける微分散乱断面積 (**Differential Scattering Cross Section**) を、量子力学的手法で導出する (非相対論の場合に限る)。今の場合次のような仮定で導出を行うことにする。

1. ボルン近似——散乱場 $V(r)$ が弱い振動と見なせる場合、散乱を摂動的に扱う——を用いる。
2. 原子核は入射粒子に比べて十分重いため、原子核の反動による運動エネルギーは無視できる。
3. 原子核、入射粒子はどちらもスピン零である。
4. 原子核、入射粒子共に内部構造は考えず、点として扱う。

以後、 \hbar, c, ϵ_0 は省略せずに書くことにする。

2 波動関数

入射粒子は波動関数を用いて、

$$\psi_i(\mathbf{r}) = N \exp\left(i \frac{\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{r}}{\hbar}\right) \quad (1)$$

と書け、同様に散乱粒子は

$$\psi_f(\mathbf{r}) = N \exp\left(i \frac{\mathbf{p}_f \cdot \mathbf{r}}{\hbar}\right) \quad (2)$$

と書け、平面波として表すことができる。ここで N は規格化定数で $N = 1/\sqrt{V}$ である。以後特に断らない限り、簡略化のために $\mathbf{p}_i = \mathbf{p}, \mathbf{p}_f = \mathbf{p}'$ 等のように散乱後の量に '(prime)' をつけることにし、また絶対値に関しては $|\mathbf{p}| = p$ 等とする。

3 遷移確率

ボルン近似を用いることで遷移確率 $\mathcal{W}_{i \rightarrow f}$ は、

$$\mathcal{W}_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\mathcal{M}_{fi}|^2 \rho(E') \quad (3)$$

なる、フェルミの黄金律 (**Fermi's Golden Rule**) で与えられる。ここで \mathcal{M}_{fi} は行列要素で

$$\mathcal{M}_{fi} = \langle \psi_f | \mathcal{H}_{\text{int}} | \psi_i \rangle \quad (4)$$

と書け、また $\rho(E')$ は状態密度である。

入射粒子の数を $N_i = n_i V$ とすると、入射粒子のフラックスは $\Phi = n_i v_i$ と書ける。また散乱された粒子の数を $N_f = n_f V$ と書く。遷移確率 $\mathcal{W}_{i \rightarrow f}$ は入射粒子が散乱される割合であり、全散乱断面積 σ は入射粒子と衝突した原子の総断面積であるから、

$$\mathcal{W}_{i \rightarrow f} = \frac{N_f}{N_i} = \frac{\Phi \sigma_{i \rightarrow f}}{N_i} = \frac{n_i v_i \sigma_{i \rightarrow f}}{N_i} = \frac{v_i}{V} \sigma_{i \rightarrow f}$$

と書ける。

4 散乱断面積

以上より全散乱断面積は

$$\sigma_{i \rightarrow f} = \frac{V}{v_i} \mathcal{W}_{i \rightarrow f}$$

と書くことができる。これより散乱断面積 $d\sigma_{i \rightarrow f}$ は

$$d\sigma_{i \rightarrow f} = \frac{V}{v_i} d\mathcal{W}_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi V}{\hbar v_i} |\mathcal{M}_{fi}|^2 d\rho(E') \quad (5)$$

で与えられる。

5 計算

5.1 状態密度

始めに状態密度 $\rho(E')$ を求める。Eq.(1), Eq.(2) より、

$$\langle \psi_f | \psi_i \rangle = N^2 \int \exp \left[i \frac{(\mathbf{p} - \mathbf{p}')}{\hbar} \cdot \mathbf{r} \right] d^3 r = \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$$

であるから、もし $\mathbf{p} = \mathbf{p}'$ で δ 関数に規格化された平面波の場合、状態密度は壺である。これより区間 $[\mathbf{p}', \mathbf{p}' + d\mathbf{p}']$ に含まれる状態の数は

$$\frac{V}{(2\pi\hbar)^3} d^3 p'$$

で与えられることが分かる。ある立体角 Ω 方向の運動量を持つ状態を考えると、これらの状態はエネルギーで区別することができる。従ってこの状態の密度として $\rho(\Omega, E')$ を考える。このとき区間 $[\Omega, \Omega + d\Omega]$ に含まれる方向の運動量を持ち、そのエネルギーが $[E', E' + dE']$ に含まれる様な状態の数は、 $\rho(\Omega, E')d\Omega dE'$ と書くことができる。(prime) がついている状態は同じ状態 (= 散乱後) を表しているので、

$$\rho(\Omega, E') d\Omega dE' = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} d^3 p'$$

の関係が成り立つ。 p' 空間を極座標で表すと $d^3 p' = p'^2 dp' d\Omega$ より、

$$\rho(\Omega, E') d\Omega dE' = \frac{V p'^2}{(2\pi\hbar)^3} dp' d\Omega$$

が成り立つ。ここで状態密度は Ω に依らないので (対称性より。 Ω に依存したとすると、何らかの非対称性が存在することになる。) $\rho(\Omega, E') = \rho(E')$ と書ける。以上より状態密度は、

$$\rho(E') = \frac{V p'^2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{dp'}{dE'} = \frac{V p'^2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{\frac{dE'}{dp'}} = \frac{p'^2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{V}{v'}, \quad \because \text{非相対論の場合より、} \quad dE' = v' dp'$$

となる。これより区間 $[\Omega, \Omega + d\Omega]$ の間にある状態密度を $d\rho(E')$ と書くことにすると、

$$\rho(E') d\Omega = d\rho(E') = \frac{p'^2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{V}{v'} d\Omega \quad (6)$$

となる。

5.2 行列要素

次に行列要素 M_{fi} を求める。今の場合 \mathcal{H}_{int} は原子核のクーロンポテンシャルだけであるから、

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = e\phi(r) = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}, \quad \because \phi(r) = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$

となるが、この場合、積分 $\langle \psi_f | \mathcal{H}_{\text{int}} | \psi_i \rangle$ は発散してしまう。そこで、原子核の周りの電子雲による遮断の効果を考え、遮断長 λ を用いて、 $\exp(-r/\lambda)$ なる因子をポテンシャルに掛けて、

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \exp\left(-\frac{r}{\lambda}\right)$$

とする。これにより積分は発散しないことになる。

以上を踏まえて積分を計算すると、 $\mathbf{q} = \mathbf{p} - \mathbf{p}'$ として

$$\begin{aligned}
\langle \psi_f | \mathcal{H}_{\text{int}} | \psi_i \rangle &= \int \psi_f^* \mathcal{H}_{\text{int}} \psi_i dV \\
&= \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 V} \int \frac{\exp\left(-\frac{r}{\lambda}\right)}{r} \exp\left(i \frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}{\hbar}\right) d^3 r = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 V} \int \frac{\exp\left(-\frac{r}{\lambda}\right)}{r} \exp\left(i \frac{qr \cos \theta}{\hbar}\right) r^2 \sin \theta d\theta d\phi dr \\
&= \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 V} \cdot 2\pi \int_0^\infty dr \int_0^\pi r \exp\left(-\frac{r}{\lambda}\right) \exp\left(i \frac{qr \cos \theta}{\hbar}\right) \sin \theta d\theta \\
&= \frac{Ze^2}{2\epsilon_0 V} \int_0^\infty dr \exp\left(-\frac{r}{\lambda}\right) \int_0^\pi \left(\frac{-\hbar}{iq}\right) \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\exp\left(i \frac{qr \cos \theta}{\hbar}\right) \right] d\theta = \frac{Ze^2}{2\epsilon_0 V} \left(\frac{-\hbar}{iq}\right) \int_0^\infty dr \exp\left(-\frac{r}{\lambda}\right) \cdot \left[\exp\left(i \frac{qr \cos \theta}{\hbar}\right) \right]_0^\pi \\
&= \frac{Ze^2}{2\epsilon_0 V} \left(\frac{-\hbar}{iq}\right) \int_0^\infty dr \exp\left(-\frac{r}{\lambda}\right) \cdot \left[\exp\left(-i \frac{qr}{\hbar}\right) - \exp\left(i \frac{qr}{\hbar}\right) \right] \\
&= \frac{Ze^2}{2\epsilon_0 V} \left(\frac{-\hbar}{iq}\right) \int_0^\infty dr \left[\exp\left\{-\left(\frac{1}{\lambda} + i \frac{q}{\hbar}\right)r\right\} - \exp\left\{-\left(\frac{1}{\lambda} - i \frac{q}{\hbar}\right)r\right\} \right] \\
&= \frac{Ze^2}{2\epsilon_0 V} \left(\frac{-\hbar}{iq}\right) \left[\frac{\exp\left(-i \frac{qr}{\hbar}\right)}{-\left(\frac{1}{\lambda} + i \frac{q}{\hbar}\right)} - \frac{\exp\left(i \frac{qr}{\hbar}\right)}{-\left(\frac{1}{\lambda} - i \frac{q}{\hbar}\right)} \right] \exp\left(-\frac{r}{\lambda}\right) \Bigg|_0^\infty = \frac{Ze^2}{2\epsilon_0 V} \left(\frac{+\hbar}{iq}\right) \left[\frac{-1}{\frac{1}{\lambda} + i \frac{q}{\hbar}} + \frac{1}{\frac{1}{\lambda} - i \frac{q}{\hbar}} \right] = \frac{Ze^2}{2\epsilon_0 V} \frac{\hbar}{iq} \frac{i \frac{2q}{\hbar}}{\frac{1}{\lambda^2} + \frac{q^2}{\hbar^2}} \\
&= \frac{Ze^2}{\epsilon_0 V} \frac{1}{\frac{1}{\lambda^2} + \frac{q^2}{\hbar^2}} = \frac{Ze^2 \hbar^2}{\epsilon_0 V q^2} \frac{1}{1 + \frac{\hbar^2}{\lambda^2 q^2}}
\end{aligned}$$

を得る。

運動量の変化の絶対値 q は波数の変化の絶対値 s を用いて $q = \hbar s$ と書ける。今原子核と粒子の衝突を考えており、また波数の逆数は長さの次元を持つことから、

$$(\text{原子核の大きさ}) \sim \frac{1}{s} = \frac{\hbar}{q}$$

であることが分かる。一方遮断は原子核のまわりの電子による効果であるから、遮断長 λ は原子の大きさ程度であると考えられる。原子の大きさは原子核の大きさに比べて 10^5 倍程度も大きいので、

$$\lambda \gg \frac{\hbar}{q} \implies \frac{\lambda^2 q^2}{\hbar^2} \gg 1$$

となる。よって最終的に行列要素 M_{fi} は、

$$M_{fi} = \frac{Ze^2 \hbar^2}{\epsilon_0 V q^2} \quad (7)$$

となる。

5.3 運動量 (移行)

Eq.(6),Eq.(7) を Eq.(5) に代入すると、

$$d\sigma_{i \rightarrow f} = \frac{V}{v_i} \frac{2\pi}{\hbar} \frac{(Ze^2)^2 \hbar^4}{\epsilon_0^2 V^2 q^4} \frac{p'^2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{V}{v_i} d\Omega = \frac{Z^2 e^4}{4\pi^2 \epsilon_0^2 q^4} \left(\frac{p'}{v_i}\right)^2 d\Omega$$

となる。

原子核が粒子に比べて十分重い場合、粒子の運動量の大きさはあまり変化しないので、 v_i と p' の比は粒子の質量のみに依存して、

$$\left(\frac{p'}{v_i}\right)^2 \approx m^2$$

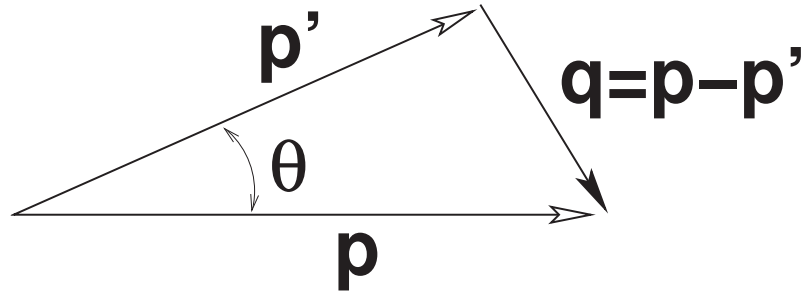


図2 運動量の変化

と書ける。運動量の変化のみを考えた場合は、図式より

$$\begin{aligned} q^2 &= |\mathbf{p} - \mathbf{p}'|^2 = p^2 + p'^2 - 2pp' \cos \theta = (p - p')^2 + 2pp' - 2pp' \cos \theta = (p - p')^2 + 2pp'(1 - \cos \theta) \\ &= (p - p')^2 + 4pp' \sin^2 \frac{\theta}{2} \end{aligned}$$

となる。先ほど同様に、運動量の大きさの変化は無視できるとすると、

$$p \approx p', \quad \text{但し } \mathbf{p} \neq \mathbf{p}'$$

であるから、

$$q^2 \approx 4p^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}$$

と書けることになる。

6 結果

以上から散乱断面積 $d\sigma_{i \rightarrow f}$ は

$$d\sigma_{i \rightarrow f} = \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{4m^2}{16p^4 \sin^4 \frac{\theta}{2}} d\Omega = \frac{1}{4} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m^2}{p^4} \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} d\Omega$$

と書ける。よってラザフォード散乱に於ける微分散乱断面積 $d\sigma/d\Omega$ は

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\text{Rutherford}} = \frac{1}{4} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m^2}{p^4} \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} = \frac{\alpha^2 m^2 \hbar^2 c^2 Z^2}{4p^4 \sin^4(\theta/2)} \quad (8)$$

となる。この式は量子力学を用いずに古典的な手法で求めた式と一致している。