数理解析研究所講究録
第779巻 1992年 149-160

Low energy scattering with penetrable wall interactions

福井高専　島田伸一 (Shin-ichi Shimada)

§1. 序

次の様なSchrödinger作用素を考える。

$$H = -\Delta + g(x)\delta(|x|-a) \quad \text{in } L_2(\mathbb{R}^3),$$

ここで、$g(x)$は半径 a の球面 $S_a = \{x \in \mathbb{R}^3 ; |x| = a\}$ 上で定義されたなめらかな実数値関数、δ は1次元Diracのデルタ関数である。この形の作用素は、α-崩壊に関するモデルとして、Petzold[4]で扱われ、Ikebe-Shimada[2]でスペクトルの構造等が調べられた。上の形式的作用素に対応する自己共役作用素は次の様に定義する。次の2次形式を考える。

$$h[u,v] = (\nabla u, \nabla v) + \langle g\gamma u, \gamma v \rangle, \quad \mathrm{Dom}[h] = H^1(\mathbb{R}^3),$$

ここで、$H^1(\mathbb{R}^3)$ は Sobolev sp.、$\gamma ; H^1(\mathbb{R}^3) \to L_2(S_a)$, trace op.、$(\ ,\ )$は$L_2(\mathbb{R}^3)$の内積、$\langle\ ,\ \rangle$ は $L_2(S_a)$ の内積である。hは、下に有界な対称閉形式であることがわかるので、唯一つの自己共役作用素Hが定まる。以後このHを考える。Hは球面の内側と外側をつないだ境界条件をもつラプラシアンになってい

る。即ち、

$$\mathrm{Dom}(H) = \{u \in L_2(\mathbb{R}^3)\ ;\ u \in H^1(\mathbb{R}^3),\ u \in H^2(\mathbb{R}^3 \setminus S_a)$$
$$\left(\frac{\partial u}{\partial r}\right)_+(x) - \left(\frac{\partial u}{\partial r}\right)_-(x) = g(x)(\gamma u)(x)\}$$

$$Hu = -\Delta u \quad \text{on } \mathbb{R}^3 \setminus S_a$$

である。($(\ )_\pm$ は外側と内側からのトレース)

このHと $H_0 = -\Delta$ ($g(x) \equiv 0$ に対応するもの)との散乱問題を考えたい。次の Lippmann-Schwinger eq. から出発する。

$$(1.1) \quad \varphi_\pm(x,\xi) = e^{i\xi\cdot x} - \frac{1}{4\pi}\int_{S_a} \frac{e^{\mp i|\xi||x-y|}}{|x-y|} g(y)\varphi_\pm(y,\xi)\, dS_y$$

(1.1)は、$\xi \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$ に対し、$C(\mathbb{R}^3)$ で一意的な解をもち、この解 $\varphi_\pm(x,\xi)$ は

$$\begin{cases} -\Delta_x \varphi_\pm(x,\xi) = |\xi|^2 \varphi_\pm(x,\xi) & \text{on } \mathbb{R}^3 \setminus S_a \\ \left(\dfrac{\partial \varphi_\pm}{\partial r}\right)_+(x,\xi) - \left(\dfrac{\partial \varphi_\pm}{\partial r}\right)_-(x,\xi) = g(x)\varphi_\pm(x,\xi) & \text{on } S_a \end{cases}$$

を満たすので、散乱波を表わしていると考えられる。特に、外向きの散乱波の遠方での挙動は、

$$\overline{\varphi_+(x,-\xi)} = e^{i\xi\cdot x} - \frac{2\pi\cdot e^{i|\xi||x|}}{|x|} F(|\xi|, \omega_x, \omega_\xi) + O\left(\frac{1}{|x|^2}\right) \quad (|x| \to \infty)$$

とわかる($\omega_x = \frac{x}{|x|}$, $\omega_\xi = \frac{\xi}{|\xi|}$)。ここで、

$$(1.2) \quad F(r,\omega,\omega') = \frac{1}{8\pi^2}\int_{S_a} dS_x\, g(x)\, e^{ir\omega'\cdot x}\, \overline{\varphi_+(x, r\omega)}$$

は、scattering amplitude と呼ばれる。このとき、S-matrix は、

$$(1.3)\quad (S_r u)(\omega) = u(\omega) - i\int_{S^2} d\omega'\, r F(r,\omega,\omega')\, u(\omega') \qquad (u \in L_2(S^2))$$

で定義される。$r>0$ に対して、$S_r - 1$ は、$L_2(S^2)$ 上の trace class に入っており、

$$(\mathcal{F} S \mathcal{F}^* u)(\xi) = \left[S_{|\xi|} u(|\xi|\cdot)\right](\omega_\xi) \qquad (u \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\}))$$

が成り立っていることがわかる（$S = W_+^* W_-$ は散乱作用素、$\mathcal{F}$ は Fourier 変換）。入射方向 ω、エネルギー r^2 $(r>0)$ の total cross section は、

$$(1.4)\quad \sigma_{tot}(r,\omega) = 4\pi^2 \int_{S^2} d\omega' \left|F(r,\omega',\omega)\right|^2$$

で定義される。

本稿の目的は、$r \downarrow 0$ のとき、$F(r,\omega,\omega')$, S_r, $\sigma_{tot}(r,\omega)$ がどの様な挙動をするか調べることである。通常の short range potential に対しては、Albeverio-Gesztesy-Høegh-Krohn [1], Jensen-Kato [3] 等がある。我々の場合は、対象が簡単なので、それだけ精しい結果が得られる。$r \downarrow 0$ のときの挙動は、H が零固有値、零レゾナンスを持つか否かによって大きく変わってくる。$g(x) \equiv V_0$（定数）の場合と比較することにより、これらの寄与は s-wave（角運動量 $l=0$）, p-wave（$l=1$）からくると考えられる。$g(x) \equiv V_0$ の時は、$\sigma_{tot}(r,\omega)$ は scattering length に関係ず

けられる。

§2. 方針と結果

結果を述べる為に、方針を示しながら、記号を準備する。

1). (1.2) の $F(r,\omega,\omega')$ を Lippmann-Schwinger eq. を利用し、次の様に表す。

(2.1) $F(r,\omega,\omega') = \frac{1}{8\pi^2}\langle (1-\tilde{T}_r)^{-1}(e^{ir\omega'\cdot}), g\, e^{ir\omega\cdot}\rangle.$

ここで、

$$(\tilde{T}_r u)(x) = \frac{-1}{4\pi}\int_{S_a} \frac{e^{ir|x-y|}}{|x-y|}\, g(y)\, u(y)\, dS_y \quad (u\in L_2(S_a),\ x\in S_a)$$

で、$\tilde{T}_r$ は $L_2(S_a)$ 上の compact op. になる。

2) Jensen-Kato [3] の方法をまねて、$r\downarrow 0$ のとき、

(2.2) $(1-\tilde{T}_r)^{-1} = C_{-2}\cdot r^{-2} + C_{-1}r^{-1} + C_0 + C_1 r + \cdots$ in $\mathbb{B}(L_2(S_a))$

と展開する。C_{-2}, C_{-1} が 0 になるかどうかは、$1-\tilde{T}_0$ の null sp. $N(1-\tilde{T}_0)$ の構造で決まる。$N(1-\tilde{T}_0)$ は次の様に直和分解（必ずしも直交直和ではない）できる。

$$N(1-\tilde{T}_0) = N_1 \oplus N_2$$

ここで、$N(1-\tilde{T}_0)$ の元 u で $\langle u, g\rangle \neq 0$ なるものは、高々 1 次元の部分空間をつくり、それを N_1 とする。$N_1 \neq \{0\}$ なら、$\langle \psi, g\rangle = (4\pi)^{\frac{1}{2}}$ と正規化した $\psi\in N(1-\tilde{T}_0)$ をとってきて、

(2.3) $N_1 = \{c\psi \; ; \; c \in \mathbb{C}\}$ と表わせる。$N_2 = \{u \in N(1-\tilde{T}_0) \; ; \; \langle u, g \rangle = 0\}$ である。このとき、$N(1-\tilde{T}_0)$ の状態に4通りの場合があり、次の様に名づける。

定義

i) $N(1-\tilde{T}_0) = \{0\}$ のとき、正則

ii) $N(1-\tilde{T}_0) = N_1 \neq \{0\}$, $N_2 = \{0\}$ のとき 第1種

iii) $N(1-\tilde{T}_0) = N_2 \neq \{0\}$, $N_1 = \{0\}$ 〃 第2種

iv) $N_1 \neq \{0\}$, $N_2 \neq \{0\}$ 〃 第3種

この場合分けと (2.2) の展開係数との関係は、

i) 正則 $\Rightarrow C_{-2} = C_{-1} = 0$

ii) 第1種 $\Rightarrow$ ある作用素 $C_{-1,1} \in \mathbb{B}(L_2(S_a))$, $C_{-1,1} \neq 0$ があって

$$C_{-1} = C_{-1,1}, \quad C_{-2} = 0$$

iii) 第2種 $\Rightarrow$ ある作用素 $C_{-2,2}$, $C_{-1,2} \in \mathbb{B}(L_2(S_a))$, $C_{-2,2} \neq 0$ があって

$$C_{-2} = C_{-2,2}, \quad C_{-1} = C_{-1,2}$$

iv) 第3種 $\Rightarrow C_{-2} = C_{-2,2}, \quad C_{-1} = C_{-1,2} + C_{-1,1}$

の様になっている。また、$N(1-\tilde{T}_0)$ と $N(H)$ (固有値0に対応する固有空間) との関係は次である。

◦ $N(1-\tilde{T}_0) = \{0\} \Rightarrow N(H) = \{0\}$

◦ N_2 と $N(H)$ が同型。特に $\tilde{T}_0$ は compact op. なので、H の零固有値に対応する固有空間は有限次元である。同型を与える写像は、trace op. (を $N(H)$ に制限したもの)

$$\gamma\ (=\gamma|_{N(H)})\ ;\ N(H) \longrightarrow N_2$$

であり，この逆写像は

$$T_0\ ;\ N_2 \longrightarrow N(H)\ ,\quad (T_0 u)(x) = \frac{-1}{4\pi}\int_{S_a} \frac{g(y)}{|x-y|} u(y)\, dS_y \quad (x \in \mathbb{R}^3)$$

で与えられる。

◦ N_1 の元は H の次の意味での零レゾナンス（関数）に対応する。即ち，$\psi \in N_1$（(2.3) の正規化したもの）に対して，$u(x) = (T_0\psi)(x)$ とおくと，$u(x)$ は次を満たす。

$$\Delta u(x) = 0 \quad on\ \mathbb{R}^3 \setminus S_a\ ,\quad \left(\frac{\partial u}{\partial r}\right)_+(x) - \left(\frac{\partial u}{\partial r}\right)_-(x) = g(x)u(x)\ \ on\ S_a$$

$$u(x) = \frac{-(4\pi)^{-\frac{1}{2}}}{|x|} + O\left(\frac{1}{|x|^2}\right) \quad as\ |x| \to \infty$$

$$\notin L_2(\mathbb{R}^3).$$

つまり，u は $L_2(\mathbb{R}^3)$ の元ではないが，形式的に $Hu=0$ を満たすものになっている。以後，H が零レゾナンスをもつなどという時は，この意味で考えることにする。

3) 次の光学定理を証明する。これは，S_r が $L_2(S^2)$ 上のユニタリー作用素となることから導かれる。

$$(2.4) \qquad \sigma_{tot}(r,\omega) = \frac{-8\pi^2}{r} \cdot \mathrm{Im}[F(r,\omega,\omega)]$$

4) 以上より，(2.2) の $(1-\tilde{T}_r)^{-1}$ の展開式が得られれば，(1.3), (2.1), (2.4) に代入して計算すれば，$F(r,\omega,\omega')$，S_r，$\sigma_{tot}(r,\omega)$ の漸近挙動が得られる。

結果を述べよう。

定理1. 正則な場合とする。このとき、$r\downarrow 0$ のとき、

$F(r,\omega,\omega')$, S_r, $\sigma_{tot}(r,\omega)$ は次の様な漸近挙動をもつ。

- $F(r,\omega,\omega') = \frac{1}{8\pi^2}\langle C_{00}1, g\rangle - \frac{ir}{32\pi^3}\langle C_{00}1, g\rangle^2 + F_0(\omega,\omega')\cdot r + O(r^2)$

- $S_r = 1 - \frac{ir}{2\pi}\langle C_{00}1, g\rangle(\cdot, Y_0^0)_{L_2(S^2)}Y_0^0 + O(r^2)$

- $\sigma_{tot}(r,\omega) = \frac{1}{4\pi}\langle C_{00}1, g\rangle^2 + O(r)$,

ここで、

$C_{00} = (1-\tilde{T}_0)^{-1}$, $Y_0^0(\omega) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ である。$\langle C_{00}1, g\rangle$ は実数値で、

$F_0(\omega,\omega')$ は $F_0(\omega,\omega)=0$ となる (ω,ω') のある連続関数である。

この場合は、散乱の寄与は主に s-wave からのものであることがわかる。

定理2. 第1種又は3種の場合とする。$r\downarrow 0$ のとき、

- $F(r,\omega,\omega') = \frac{-i}{2\pi}r^{-1} + O(1)$

- $S_r = 1 - 2(\cdot, Y_0^0)_{L_2(S^2)}Y_0^0 + O(r)$

- $\sigma_{tot}(r,\omega) = 4\pi\cdot r^{-2} + O(r^{-1})$

この場合は、散乱の寄与は、主に s-wave からのものであり、そこで共鳴を起こして $\sigma_{tot}(r,\omega)$ が増大していくと考えられる。

定理3. 第2種の場合とする。$r \downarrow 0$ のとき

- $F(r,\omega,\omega') = F_{20}(\omega,\omega') + r \cdot F_{21}(\omega,\omega') + O(r^2)$

- $S_r = 1 - irF_{20} + O(r^2)$

- $\sigma_{tot}(r,\omega) = \frac{1}{4\pi}\langle \mathrm{Re}(K1), g\rangle^2 + i\langle g A_3 P g\cdot(\omega\cdot x), P g\cdot(\omega\cdot x)\rangle + O(r)$

ここで、

$$F_{20}(\omega,\omega') = \frac{1}{16\pi^2}\Big(\langle P g\cdot(\omega'\cdot x), g\cdot(\omega\cdot x)\rangle + \langle P g\cdot(\omega\cdot x), g\cdot(\omega'\cdot x)\rangle\Big)$$
$$+ \frac{1}{8\pi^2}\langle \mathrm{Re}(K1), g\rangle$$

A_j は $\tilde{T}_K = \sum_{j=0}^{\infty} K^j A_j$ in $\mathbb{B}(L_2(S_a))$ と展開したときの K^j の係数で

$$(A_j u)(x) = \frac{-i^j}{4\pi j!}\int_{S_a} |x-y|^{j-1} g(y)\, u(y)\, dS_y \qquad (u \in L_2(S_a))$$

である。$L_2(\mathbb{R}^3)$ 上の $N(H)$ への正射影を P_0 とおくとき、$P = \gamma P_0 \cdot (\gamma P_0)^* \in \mathbb{B}(L_2(S_a))$ とおく。$\{u_j\}_{j=1}^{n}$ を $N(H)$ の正規直交基底とするとき $P = \sum_{j=1}^{n} \langle \cdot, \gamma u_j\rangle \gamma u_j$ と表わせる。K は、Q を $L_2(S_a)$ 上の $N(1-\tilde{T}_0)$ への射影としたとき、$K = (1-\tilde{T}_0 - Q)^{-1}(1-Q)$ と定義したものである。$F_{20}(\omega,\omega')$ は ω と ω' について1次以下なので、散乱は s-wave, p-wave が主に寄与していると考えられる。これは、$g(x)$ が定数の時には一層はっきりするであろう（§3参照）。

§3. $g(x) \equiv V_0$（定数）の場合

$g(x)$ が定数の場合は、Lippmann-Schwinger eq. (1.1) が球面調和関数を用いて具体的に解けるので、散乱波の各運動量成分の寄与がはっきりとわかる。まず、ポテンシャル V_0 の値によって $N(1-\tilde{T}_0)$ がどの様な場合になるか分類しておく。

<u>定理4.</u> $g(x) \equiv V_0$ とする。

1) $V_0 \neq -\frac{1}{a}(2l+1)$, $(l=0,1,2,\cdots)$ ならば、正則な場合になる。即ち $N(1-\tilde{T}_0) = \{0\}$

2) $V_0 = -\frac{1}{a}$, $(l=0)$ ならば、第1種の場合になる。即ち、$N(1-\tilde{T}_0) = N_1$。このとき、$\psi(x) = -\frac{1}{a}\frac{1}{\sqrt{4\pi}} = -\frac{1}{a}Y_0^0(\omega_x)$ となり、レゾナンス関数 $(T_0\psi)(x)$ は、次の様になる。

$$(T_0\psi)(x) = \begin{cases} \dfrac{-1}{\sqrt{4\pi}\,a} & (|x| \leq a) \\[2ex] \dfrac{-1}{\sqrt{4\pi}\,|x|} & (|x| \geq a) \end{cases}$$

3) $V_0 = -\frac{1}{a}(2l+1)$, $(l=1,2,\cdots)$ ならば、第2種の場合になる。このとき、$N(1-\tilde{T}_0) = N_2 = \left\{\sum_{m=-l}^{l} c_m Y_l^m \,;\, c_m \in \mathbb{C}\right\}$、ここで、$Y_l^m = Y_l^m(\omega)$ $(m=-l,-l+1,\cdots,l,\ l=0,1,2,\cdots)$ は、球面調和関数を表す。これは、$\frac{e^{ik|x-y|}}{4\pi|x-y|}$ の部分波展開の式を用いて、$(1-\tilde{T}_0)u=0$ を直接解くことによって得られる。さらに、$e^{i\xi\cdot x}$ の部分波展開の式を用いて、Lippmann-Schwinger eq. (1.1) の解を求めることができる。即ち、$\xi \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$, $r>0$ に対し、

$$(3.1)\quad \overline{\varphi_+(r\omega,\xi)} = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} \varphi_{lm}(r,\xi)\, Y_l^m(\omega) \quad \text{in } L_2(S^2),$$

ここで、

$$\varphi_{lm}(r,\xi)$$

$$= 4\pi(-i)^l \left\{ j_l(kr) - \frac{iV_0 a^2 k\, j_l(ak)\, j_l(kr_<)\, h_l^{(1)}(kr_>)}{1+iV_0 a^2 k\cdot j_l(ak)\, h_l^{(1)}(ak)} \right\} \overline{Y_l^m(\omega_\xi)},$$

$(\xi = k\omega_\xi,\ r_< = \min(r,a),\ r_> = \max(r,a))$. j_l, $h_l^{(1)}$ $(l=0,1,2,\cdots)$

は、それぞれ球面Bessel関数、第1種球面Hankel関数である。

特に

$$(3.2)\quad \varphi_{lm}(a,\xi) = \frac{4\pi(-i)^l j_l(ak)\overline{Y_l^m(\omega_\xi)}}{1+iV_0 a^2 k\cdot j_l(ak)\, h_l^{(1)}(ak)}$$

が得られる。

(3.1), (3.2) を (1.2), (1.3) に代入して計算することにより $F(r,\omega,\omega')$ の各角運動量成分への分解式、S_r に対しては、位相のずれの公式が得られる。

定理5. $r>0$ に対して

1) $$F(r,\omega,\omega') = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} \frac{4\pi}{2l+1} F_l(r)\, Y_l^m(\omega)\overline{Y_l^m(\omega')} = \sum_{l=0}^{\infty} F_l(r)\, P_l(\omega\cdot\omega')$$

2) $$S_r = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} e^{2i\delta_l(r)} (\cdot, Y_l^m)_{L_2(S^2)} Y_l^m$$

ここで、

P_l $(l=0,1,2,\cdots)$ は Legrendre 多項式、

$$(3.3)\quad F_l(r) = \frac{2l+1}{2\pi}\cdot \frac{V_0 a^2 j_l^2(ar)}{1+iV_0 a^2 r\cdot j_l(ar)\, h_l^{(1)}(ar)}$$

$$(3.4) \quad e^{2i\delta_\ell(k)} = 1 - \frac{4\pi i k}{2\ell+1} F_\ell(k) \quad , -\frac{\pi}{2} \le \delta_\ell(k) < \frac{\pi}{2}$$

である。1)は絶対収束，2)は$L_2(S^2)$の強収束の意味である。$F_\ell(k)$が散乱波の角運動量ℓの成分の散乱振幅を表わしていると考えられる。各$F_\ell(k)$の$k\downarrow 0$の時の挙動は次の様である。

。$F_0(k) = \begin{cases} \dfrac{V_0 a^2}{2\pi(1+V_0 a)} - \dfrac{i V_0^2 a^4}{2\pi(1+V_0 a)^2} \cdot k + O(k^2) & (V_0 \neq -\frac{1}{a} \text{ の時}) \\ \dfrac{-i}{2\pi k} - \dfrac{a}{8\pi} + \dfrac{2 i a^2}{9\pi} k + O(k^2) & (V_0 = -\frac{1}{a} \text{ の時}) \end{cases}$

。$F_1(k) = \begin{cases} \dfrac{V_0 a^4 k^2}{2\pi(3+V_0 a)} + O(k^4) & (V_0 \neq -\frac{3}{a} \text{ の時}) \\ \dfrac{5a}{4\pi} - \dfrac{25 i a^2 k}{24\pi} + O(k^2) & (V_0 = -\frac{3}{a} \text{ の時}) \end{cases}$

。$F_\ell(k) = \begin{cases} O(k^{2\ell}) & (V_0 \neq -\frac{2\ell+1}{a} \text{ の時}) \\ O(k^{2(\ell-1)}) & (V_0 = -\frac{2\ell+1}{a} \text{ の時}) \end{cases}$

$(\ell = 2, 3, \cdots\cdots)$

これと，定理1.2.3を較べれば，$V_0 \neq -\frac{3}{a}$時はすべて，S-waveからのものが散乱の寄与の主要項になり，時に$V_0 = -\frac{1}{a}$の時に起こる零共鳴はS-waveからのものであることがわかる。$V_0 = -\frac{3}{a}$の時は，S-waveとP-waveが散乱の主要項に寄与する。

scattering length αは，

$$\alpha = -\lim_{k\downarrow 0} \frac{\delta_0(k)}{k}$$

で定義される。(3.4)から次がわかる。

定理6. $V_0 \neq -\frac{1}{a}$ のとき scattering length α が存在し，
$\alpha = \frac{V_0 a^2}{1+V_0 a}$ である。

$V_0 \neq -\frac{1}{a}, -\frac{3}{a}$ のときは，scattering length α は，$\sigma_{tot}(r,\omega)$ の $r \downarrow 0$ の時の挙動を特徴づける量である。実際にこのとき，

$$\sigma_{tot}(r,\omega) = 4\pi\alpha^2 + O(r^2)$$

となることがわかる。

参考文献

[1] Albeverio, S., Gesztesy, F. and R. Høegh-Krohn : The low energy expansion in nonrelativistic scattering theory, Ann. Inst. Henri Poincaré, Sect. A 37 (1982), 1–28.

[2] Ikebe, T. and S. Shimada : Spectral and scattering theory for the Schrödinger operators with penetrable wall interactions, J. Math. Kyoto Univ. 31-1 (1991), 219–258.

[3] Jensen, A. and T. Kato ; Spectral properties of Schrödinger operators and time-decay of the wave functions, Duke Math. J. 46 (1979), 583–611.

[4] Petzold, J. ; Wie gut gilt das exponentialgesetz beim α-zerfall?, Zeits. f. Phys. 155 (1959), 422–432.

[5] Shimad, S. ; Low energy scattering with a penetrable wall interaction, preprint.