散乱セミナー　(自主ゼミ用)

ハミルトニアンが $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}$ ($\hat{H}_0\equiv\frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}^2$) の系の散乱過程を，相互作用描像 (§IV-7) で表現しよう．シュレディンガー描像の状態ベクトル $|\psi(t)\rangle_{\mathrm{S}}$ は運動方程式

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle_{\mathrm{S}}=\hat{H}|\psi(t)\rangle_{\mathrm{S}} \tag{1}$$

に従う．相互作用描像の状態ベクトル $|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}$ はシュレディンガー描像の $|\psi(t)\rangle_{\mathrm{S}}$ から

$$|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}|\psi(t)\rangle_{\mathrm{S}} \tag{2}$$

で定義される．(1) から $|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}$ の運動方程式を導くと

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}=\hat{V}_{\mathrm{I}}(t)|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}\ ,\qquad \hat{V}_{\mathrm{I}}(t)\equiv e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}\hat{V}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t} \tag{3}$$

となる (この方程式は $\hat{V}$ に時間依存性があっても成り立つ)．(3) を形式的に積分すると

$$|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}=|\psi(t_0)\rangle_{\mathrm{I}}+\int_{t_0}^{t}\frac{dt_1}{i\hbar}\hat{V}_{\mathrm{I}}(t_1)|\psi(t_1)\rangle_{\mathrm{I}} \tag{4}$$

となる．右辺に出てくる $|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}$ をこの表式全体で置き換える操作を逐次行なうと

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}} &= \left(\hat{1}+\int_{t_0}^{t}\frac{dt_1}{i\hbar}\hat{V}_{\mathrm{I}}(t_1)+\int_{t_0}^{t}\frac{dt_2}{i\hbar}\hat{V}_{\mathrm{I}}(t_2)\int_{t_0}^{t_2}\frac{dt_1}{i\hbar}\hat{V}_{\mathrm{I}}(t_1)+\cdots\right)|\psi(t_0)\rangle_{\mathrm{I}}\\ &\equiv \hat{U}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle_{\mathrm{I}}\end{aligned} \tag{5}$$

が求まる．演算子 $\hat{U}(t,t_0)$ は，$|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}=\hat{U}(t,t')|\psi(t')\rangle_{\mathrm{I}}=\hat{U}(t,t')\hat{U}(t',t_0)|\psi(t_0)\rangle_{\mathrm{I}}$ により，

$$\hat{U}(t,t')\hat{U}(t',t_0)=\hat{U}(t,t_0)\ ,\quad \hat{U}(t,t)=\hat{1}\ ,\quad \hat{U}(t',t)=\hat{U}(t,t')^{-1} \tag{6}$$

を満たす．さらに $\hat{V}_{\mathrm{I}}(t)$ のエルミート性 $\hat{V}_{\mathrm{I}}(t)^\dagger=\hat{V}_{\mathrm{I}}(t)$ により

$$\hat{U}(t,t_0)^\dagger=\hat{U}(t_0,t) \tag{7}$$

が $\hat{V}_{\mathrm{I}}(t)$ の各ベキごとに成り立つことが確かめられる．したがって，(6) の第３式により，$\hat{U}(t,t_0)$ はユニタリー演算子 $\hat{U}(t,t_0)^\dagger\hat{U}(t,t_0)=\hat{1}$ である．

準備はここまでにして，これから本題の散乱過程を考察しよう．(5) で，$t_0=-T/2$, $t=T/2$ とおいて $T\to\infty$ の極限をとった状態を

$$\lim_{T\to\infty}|\psi(-T/2)\rangle_{\mathrm{I}}\equiv|\psi_i\rangle\ ,\qquad \lim_{T\to\infty}|\psi(T/2)\rangle_{\mathrm{I}}\equiv|\psi_f\rangle \tag{8}$$

と定義しよう．散乱過程において，時刻 $t\to\pm\infty$ には，粒子は散乱標的から大きく遠ざかっているので $\hat{V}$ の力は及ばない．したがって (3) により $|\psi_i\rangle,|\psi_f\rangle$ には T 依存性はない．この極限で (5) を

$$|\psi_f\rangle=\hat{S}|\psi_i\rangle\ ,\quad \hat{S}\equiv\lim_{T\to\infty}\hat{U}(T/2,-T/2) \tag{9}$$

と表そう．演算子 $\hat{S}$ は S 行列 (scattering matrix) と呼ばれる．$\hat{V}=0$ だと $\hat{S}=\hat{1}$ だから

$$\hat{S}=\hat{1}+i\hat{T} \tag{10}$$

と書くと，$\hat{T}$ は相互作用の効果を表しており，T 行列 (transition matrix) と呼ばれる．$\hat{S}$ のユニタリー性 $\hat{S}^\dagger\hat{S} = \hat{1}$ により確率の保存 $\langle\psi_f|\psi_f\rangle = \langle\psi_i|\psi_i\rangle$ が成り立ち，$\hat{T}$ は

$$-i(\hat{T} - \hat{T}^\dagger) = \hat{T}^\dagger\hat{T} \tag{11}$$

を満たす．

$|\psi_i\rangle$ も $|\psi_f\rangle$ も $\hat{H}_0 = \frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}^2$ で自由運動をしている状態である．その状態空間の基底ベクトルとして，運動量の固有ベクトル $\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}\rangle = \mathbf{p}|\mathbf{p}\rangle$, $\langle\mathbf{p}'|\mathbf{p}\rangle = \delta^3(\mathbf{p}' - \mathbf{p})$ を用いよう．時刻 $t = -T/2$ に始状態が $|\mathbf{p}\rangle$ であったとしよう．時刻 $t = T/2$ に終状態が $|\mathbf{p}'\rangle$ に遷移している確率振幅は $\langle\mathbf{p}'|i\hat{T}|\mathbf{p}\rangle$ である．今採用している状態ベクトル $|\mathbf{p}\rangle$ の規格化のもとでは

$$\int d^3\mathbf{p}' \left|\langle\mathbf{p}'|\hat{S}|\mathbf{p}\rangle\right|^2 = \int d^3\mathbf{p}'\langle\mathbf{p}|\hat{S}^\dagger|\mathbf{p}'\rangle\langle\mathbf{p}'|\hat{S}|\mathbf{p}\rangle = \langle\mathbf{p}|\mathbf{p}\rangle = \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p}) \tag{12}$$

だから，終状態の全確率が 1 となるように確率を規格化したときの遷移確率は

$$dP = \frac{1}{\delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p})}\left|\langle\mathbf{p}'|\hat{T}|\mathbf{p}\rangle\right|^2 d^3\mathbf{p}' \tag{13}$$

と表される．遷移の過程でエネルギーは保存されるので $\hat{T}$ の行列要素はエネルギーの δ 関数を含む．それをあらわに出して

$$\langle\mathbf{p}'|\hat{T}|\mathbf{p}\rangle = \delta(E' - E)T(\mathbf{p}', \mathbf{p}) \ , \qquad E \equiv \frac{\mathbf{p}^2}{2m}, \ \ E' \equiv \frac{\mathbf{p}'^2}{2m} \tag{14}$$

と書こう．(13) の中に現れる δ 関数の積は $\delta(E' - E)\delta(E' - E) = \delta(E - E)\delta(E' - E)$ なので，遷移確率 (13) は

$$dP = \frac{\delta(E - E)}{\delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p})}\left|T(\mathbf{p}', \mathbf{p})\right|^2 \delta(E' - E)d^3\mathbf{p}' \tag{15}$$

となる．(15) に現れている $\delta(E - E)$, $\delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p})$ は発散量だから注意深く取り扱わなければならない．δ 関数の定義により，それらは

$$\delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p}) = \int \frac{d^3\mathbf{x}}{(2\pi\hbar)^3}e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p})\cdot\mathbf{x}} = \left.\frac{V}{(2\pi\hbar)^3}\right|_{V\to\infty} \tag{16}$$

$$\delta(E - E) = \lim_{T\to\infty}\int_{-T/2}^{T/2}\frac{dt}{2\pi\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}(E-E)t} = \left.\frac{T}{2\pi\hbar}\right|_{T\to\infty} \tag{17}$$

である．ここに V は全 3 次元体積である．さらに，

$$d^3\mathbf{p}' = p'^2dp'd\Omega \ , \ \ \delta(E' - E) = \delta\left(\frac{(p' + p)(p' - p)}{2m}\right) = \frac{m}{p}\delta(p' - p) \tag{18}$$

をもちいて dp' についての積分を実行すると，遷移確率の最終表式として

$$dP = (2\pi\hbar)^2\frac{T}{V}\left|T(\mathbf{p}', \mathbf{p})\right|^2 mpd\Omega \tag{19}$$

が求まる．dP は始状態から終状態までの時間間隔 T の間に遷移する確率だから，単位時間当りの遷移確率 dw は

$$dw \equiv \frac{dP}{T} = \frac{(2\pi\hbar)^2}{V}\left|T(\mathbf{p}', \mathbf{p})\right|^2 mpd\Omega \tag{20}$$

である．

この遷移確率から散乱断面積を導こう．散乱断面積は，標的に向かって単位時間に単位断面積を通過する入射粒子の個数 N_i と，単位時間当りに立体角 $d\Omega$ の中に散乱される粒子の個数 dN_s の比

$$d\sigma \equiv \frac{dN_s}{N_i} \tag{21}$$

で定義される．始状態は全体積 V の中に１個の粒子が運動量 $\mathbf{p}$ をもって運動している状態だから，単位体積当りの個数は $1/V$ 個である．これに粒子の速度 $v = p/m$ をかけた $p/(mV)$ が入射粒子の N_i に相当する．この時の単位時間当りの散乱粒子の個数 dN_s は単位時間当りの遷移確率 $dw \times [\,1\,\text{個}]$ に相当している．したがって

$$d\sigma = \frac{dw}{\frac{p}{mV}} = |2\pi\hbar m T(\mathbf{p}', \mathbf{p})|^2 d\Omega \tag{22}$$

である．微分散乱断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\mathbf{p}', \mathbf{p})|^2 \ , \qquad f(\mathbf{p}', \mathbf{p}) \equiv 2\pi\hbar m T(\mathbf{p}', \mathbf{p}) \tag{23}$$

と表される．$f(\mathbf{p}', \mathbf{p})$ は散乱振幅である．

確率の保存の式 (11) の対角行列要素をとると

$$\begin{aligned} 2\mathrm{Im}\langle \mathbf{p}|\hat{T}|\mathbf{p}\rangle &= \int d^3\mathbf{p}' \langle \mathbf{p}|\hat{T}^\dagger|\mathbf{p}'\rangle\langle \mathbf{p}'|\hat{T}|\mathbf{p}\rangle && (24) \\ \delta(E-E) 2\mathrm{Im}T(\mathbf{p}, \mathbf{p}) &= \delta(E-E)\int d^3\mathbf{p}' \delta(E'-E)|T(\mathbf{p}', \mathbf{p})|^2 \\ &= \delta(E-E) mp \int d\Omega |T(\mathbf{p}', \mathbf{p})|^2 && (25) \end{aligned}$$

となる．これは，散乱振幅 $f(\mathbf{p}', \mathbf{p})$ で表すと，部分波展開の方法で導いた光学定理の式

$$\mathrm{Im} f(\mathbf{p}, \mathbf{p}) = \frac{p}{4\pi\hbar}\int d\Omega |f(\mathbf{p}', \mathbf{p})|^2 = \frac{p}{4\pi\hbar}\sigma_{\mathrm{Tot.}} \tag{26}$$

になっている．光学定理は，量子力学における確率の保存の法則を，散乱過程という物理現象の中で表現したものなのである．

(9) の $\hat{S}$ を $\hat{V}_{\mathrm{I}}$ について摂動展開すると，(10) の $\hat{T}$ の摂動の１次の項は

$$\hat{T}^{(1)} = -\frac{1}{\hbar}\lim_{T\to\infty}\int_{-T/2}^{T/2} dt e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\hat{V} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \tag{27}$$

となる．行列要素をとると

$$\langle \mathbf{p}'|\hat{T}^{(1)}|\mathbf{p}\rangle = -\frac{1}{\hbar}\lim_{T\to\infty}\int_{-T/2}^{T/2} dt e^{\frac{i}{\hbar}(E'-E)t}\langle \mathbf{p}'|\hat{V}|\mathbf{p}\rangle = -2\pi\delta(E'-E)\langle \mathbf{p}'|\hat{V}|\mathbf{p}\rangle \tag{28}$$

である．これから摂動の１次での散乱振幅

$$\begin{aligned} f^{(1)}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) &= -4\pi^2\hbar m \langle \mathbf{p}'|\hat{V}|\mathbf{p}\rangle \\ &= -4\pi^2\hbar m \int d^3\mathbf{x} \langle \mathbf{p}'|\mathbf{x}\rangle V(\mathbf{x})\langle \mathbf{x}|\mathbf{p}\rangle \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3\mathbf{x} e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}'-\mathbf{p})\cdot\mathbf{x}} V(\mathbf{x}) && (29) \end{aligned}$$

が得られる．これはボルン近似の方法で導いた散乱振幅である．

高次の摂動を相互作用描像で系統的に取り扱うには少し工夫が必要である．これまで，時刻 $t\to\pm\infty$ において粒子には $\hat{V}$ の力が及ばないとしたが，いま採用している運動量の固有ベクトル $|\mathbf{p}\rangle$ は全空間 V に拡がった平面波だから，$t\to-\infty$ の始状態でも $\hat{V}$ の力を受けてしまう．ここで考察している過程が散乱過程であり，$t\to-\infty$ には粒子は自由運動をしていたということを明白に表現するために，ポテンシャル $\hat{V}_{\rm I}(t)$ を $t\leq 0$ の領域で修正して，断熱因子と呼ばれる因子をかけた $\hat{V}_{\rm I}(t)e^{-\epsilon|t|}$ で置き換える．ϵ は正の微少量で，計算が終わったあとに $\epsilon\to+0$ とする．

まず始状態を $|\mathbf{p}\rangle$ として，(5) の $|\psi(t)\rangle_{\rm I}$ を $t\leq 0$ の領域で求める．摂動展開の 1 次に出てくる積分量を $t_0\to-\infty$ の極限で

$$\begin{aligned}
|\psi_1(t)\rangle &\equiv \int_{-\infty}^{t}\frac{dt_1}{i\hbar}\hat{V}(t_1)e^{+\epsilon t_1}|\mathbf{p}\rangle \\
&= \int_{-\infty}^{t}\frac{dt_1}{i\hbar}e^{\frac{-1}{i\hbar}\hat{H}_0t_1}\hat{V}e^{\frac{1}{i\hbar}\hat{H}_0t_1+\epsilon t_1}|\mathbf{p}\rangle \\
&= \int_{-\infty}^{t}\frac{dt_1}{i\hbar}e^{\frac{1}{i\hbar}(E-\hat{H}_0)t_1+\epsilon t_1}\hat{V}|\mathbf{p}\rangle \\
&\equiv \hat{F}(t)\hat{V}|\mathbf{p}\rangle
\end{aligned}\tag{30}$$

とおこう．$\hat{F}(t)$ は積分を実行すると

$$\hat{F}(t)=\int_{-\infty}^{t}\frac{dt_1}{i\hbar}e^{\frac{1}{i\hbar}(E-\hat{H}_0+i\epsilon)t_1}=\frac{e^{\frac{1}{i\hbar}(E-\hat{H}_0+i\epsilon)t}}{E-\hat{H}_0+i\epsilon}\tag{31}$$

である．(5) の摂動の 2 次の積分量は

$$\begin{aligned}
|\psi_2(t)\rangle &\equiv \int_{-\infty}^{t}\frac{dt_2}{i\hbar}\hat{V}(t_2)e^{+\epsilon t_2}|\psi_1(t_2)\rangle \\
&= \int_{-\infty}^{t}\frac{dt_2}{i\hbar}e^{\frac{-1}{i\hbar}\hat{H}_0t_2}\hat{V}e^{\frac{1}{i\hbar}\hat{H}_0t_2+\epsilon t_2}\hat{F}(t_2)\hat{V}|\mathbf{p}\rangle \\
&= \int_{-\infty}^{t}\frac{dt_2}{i\hbar}e^{\frac{1}{i\hbar}(E-\hat{H}_0)t_2+\epsilon t_2}\hat{V}\frac{1}{E-\hat{H}_0+i\epsilon}\hat{V}|\mathbf{p}\rangle \\
&= \hat{F}(t)\hat{V}\frac{1}{E-\hat{H}_0+i\epsilon}\hat{V}|\mathbf{p}\rangle
\end{aligned}\tag{32}$$

となる．高次の摂動項も同様で，n 次の積分量は

$$|\psi_n(t)\rangle=\hat{F}(t)\left(\hat{V}\frac{1}{E-\hat{H}_0+i\epsilon}\right)^{n-1}\hat{V}|\mathbf{p}\rangle\tag{33}$$

と表される．したがって $t\leq 0$ の $|\psi(t)\rangle_{\rm I}$ が

$$|\psi(t)\rangle_{\rm I}=|\mathbf{p}\rangle+\hat{F}(t)\sum_{n=1}^{\infty}\left(\hat{V}\frac{1}{E-\hat{H}_0+i\epsilon}\right)^{n-1}\hat{V}|\mathbf{p}\rangle\tag{34}$$

と求まる．

時刻 $t=0$ の状態を $|\psi(0)\rangle_{\rm I}\equiv|\psi_{\mathbf{p}}^{(+)}\rangle$ と表すと

$$\begin{aligned}
|\psi_{\mathbf{p}}^{(+)}\rangle &= |\mathbf{p}\rangle+\frac{1}{E-\hat{H}_0+i\epsilon}\sum_{n=1}^{\infty}\left(\hat{V}\frac{1}{E-\hat{H}_0+i\epsilon}\right)^{n-1}\hat{V}|\mathbf{p}\rangle \\
&= |\mathbf{p}\rangle+\frac{1}{E-\hat{H}_0+i\epsilon}\hat{V}\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{1}{E-\hat{H}_0+i\epsilon}\hat{V}\right)^{n}|\mathbf{p}\rangle
\end{aligned}\tag{35}$$

である．この２行目の表式の第２項の $\sum$ 以降は $|\psi_{\mathbf{p}}^{(+)}\rangle$ に等しいので $|\psi_{\mathbf{p}}^{(+)}\rangle$ は方程式

$$|\psi_{\mathbf{p}}^{(+)}\rangle = |\mathbf{p}\rangle + \frac{1}{E-\hat{H}_0+i\epsilon}\hat{V}|\psi_{\mathbf{p}}^{(+)}\rangle \tag{36}$$

を満たす．これはリップマン・シュウィンガー方程式である．

$$0 = (E-\hat{H}_0)|\mathbf{p}\rangle = (E-\hat{H}_0)\left(\hat{1} - \frac{1}{E-\hat{H}_0+i\epsilon}\hat{V}\right)|\psi_{\mathbf{p}}^{(+)}\rangle = (E-\hat{H})|\psi_{\mathbf{p}}^{(+)}\rangle \tag{37}$$

により，$|\psi_{\mathbf{p}}^{(+)}\rangle$ はエネルギー E をもった $\hat{H}$ の固有状態

$$\hat{H}|\psi_{\mathbf{p}}^{(+)}\rangle = E|\psi_{\mathbf{p}}^{(+)}\rangle \tag{38}$$

である．$t=0$ の状態 $|\psi(0)\rangle_{\mathrm{I}}$ が不定性なしに求まったので，これ以降は，$\epsilon \to +0$ とおく．

シュレディンガー描像の状態ベクトル $|\psi(t)\rangle_{\mathrm{S}}$ は (2) により時刻 $t=0$ において $|\psi(0)\rangle_{\mathrm{S}} = |\psi(0)\rangle_{\mathrm{I}} = |\psi_{\mathbf{p}}^{(+)}\rangle$ だから，時刻 t の状態は

$$|\psi(t)\rangle_{\mathrm{S}} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\psi_{\mathbf{p}}^{(+)}\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}|\psi_{\mathbf{p}}^{(+)}\rangle \tag{39}$$

である．これを相互作用描像の状態ベクトル $|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}$ にもどすと

$$|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}} = e^{+\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}|\psi(t)\rangle_{\mathrm{S}} = e^{+\frac{i}{\hbar}(\hat{H}_0-E)t}|\psi_{\mathbf{p}}^{(+)}\rangle \tag{40}$$

であるが，(36) をもちいると

$$|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}} = |\mathbf{p}\rangle + \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{H}_0-E)t}}{E-\hat{H}_0+i\epsilon}\hat{V}|\psi_{\mathbf{p}}^{(+)}\rangle \tag{41}$$

と表される．

始状態 $|\mathbf{p}\rangle$ を終状態に進める演算は

$$\begin{aligned}\hat{S}|\mathbf{p}\rangle &= \lim_{t\to\infty}|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}} \\ &= |\mathbf{p}\rangle + \lim_{t\to\infty}\frac{e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{H}_0-E)t}}{E-\hat{H}_0+i\epsilon}\hat{V}|\psi_{\mathbf{p}}^{(+)}\rangle \end{aligned}\tag{42}$$

となる．右辺の第２項に運動量の固有ベクトルの完全性 $\int d^3\mathbf{k}|\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}| = \hat{1}$ を挿入すると

$$\lim_{t\to\infty}\int d^3\mathbf{k}\frac{e^{\frac{i}{\hbar}(E_k-E)t}}{E-E_k+i\epsilon}|\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}|\hat{V}|\psi_{\mathbf{p}}^{(+)}\rangle\ , \qquad E_k \equiv \frac{\mathbf{k}^2}{2m} \tag{43}$$

であるが，$t\to\infty$ の極限では E_k が E から離れたところの積分は，指数関数の激しい位相の回転によってキャンセルして積分に寄与しない．したがってこの積分は

$$\lim_{t\to\infty}\int_0^\infty dE_k\frac{e^{\frac{i}{\hbar}(E_k-E)t}}{E-E_k+i\epsilon}\left[\int k^2\frac{dk}{dE_k}d\Omega_{\mathbf{k}}|\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}|\hat{V}|\psi_{\mathbf{p}}^{(+)}\rangle\right]_{\mathbf{k}^2=\mathbf{p}^2} \tag{44}$$

となる．$z \equiv (E_k-E)t$ と置くと E_k の積分は

$$\lim_{t\to\infty}\int_0^\infty dE_k\frac{e^{\frac{i}{\hbar}(E_k-E)t}}{E-E_k+i\epsilon} = -\lim_{t\to\infty}\int_{-Et}^\infty dz\frac{e^{\frac{i}{\hbar}z}}{z-i\epsilon} \tag{45}$$

である．z の積分路は複素上半面を囲む閉じた経路に拡張できるので，$z=i\epsilon$ の極の留数を拾って，この積分は $-2\pi i$ になる．したがって (44) は

$$
\begin{aligned}
&-2\pi i\int_0^\infty dE_k\delta(E_k-E)\int k^2\frac{dk}{dE_k}d\Omega_{\mathbf{k}}|\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}|\hat{V}|\psi_{\mathbf{p}}^{(+)}\rangle \\
&=-2\pi i\delta(\hat{H}_0-E)\int d^3\mathbf{k}|\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}|\hat{V}|\psi_{\mathbf{p}}^{(+)}\rangle \\
&=-2\pi i\delta(\hat{H}_0-E)\hat{V}|\psi_{\mathbf{p}}^{(+)}\rangle
\end{aligned}
\tag{46}
$$

と表される．これを (42) にもどして，$\hat{S}$ の作用の最終表式が

$$
\hat{S}|\mathbf{p}\rangle=|\mathbf{p}\rangle-2\pi i\delta(\hat{H}_0-E)\hat{V}|\psi_{\mathbf{p}}^{(+)}\rangle \tag{47}
$$

と求まった．この式は終状態 $\hat{S}|\mathbf{p}\rangle$ がエネルギー E をもった $\hat{H}_0$ の固有状態であることを示している．

遷移振幅は

$$
\begin{aligned}
\langle\mathbf{p}'|i\hat{T}|\mathbf{p}\rangle &= -2\pi i\delta(E'-E)\langle\mathbf{p}'|\hat{V}|\psi_{\mathbf{p}}^{(+)}\rangle \\
&= -2\pi i\delta(E'-E)\sum_{n=1}^{\infty}\langle\mathbf{p}'|\left(\hat{V}\frac{1}{E-\hat{H}_0+i\epsilon}\right)^{n-1}\hat{V}|\mathbf{p}\rangle
\end{aligned}
\tag{48}
$$

であり，散乱振幅の摂動展開が

$$
f(\mathbf{p}',\mathbf{p})=-4\pi^2\hbar m\sum_{n=1}^{\infty}\langle\mathbf{p}'|\left(\hat{V}\frac{1}{E-\hat{H}_0+i\epsilon}\right)^{n-1}\hat{V}|\mathbf{p}\rangle \tag{49}
$$

によって求められる．

例えば摂動の 2 次の振幅は，座標 $\hat{\mathbf{x}}$ の固有ベクトル $|\mathbf{x}\rangle$ の完全性 $\int d^3\mathbf{x}|\mathbf{x}\rangle\langle\mathbf{x}|=\hat{1}$ を 2 個所に挿入すると

$$
\begin{aligned}
f^{(2)}(\mathbf{p}',\mathbf{p}) &= -4\pi^2\hbar m\langle\mathbf{p}'|\hat{V}\frac{1}{E-\hat{H}_0+i\epsilon}\hat{V}|\mathbf{p}\rangle \\
&= -4\pi^2\hbar m\int d^3\mathbf{x}d^3\mathbf{y}\langle\mathbf{p}'|\mathbf{x}\rangle V(\mathbf{x})\langle\mathbf{x}|\frac{1}{E-\hat{H}_0+i\epsilon}|\mathbf{y}\rangle V(\mathbf{y})\langle\mathbf{y}|\mathbf{p}\rangle
\end{aligned}
\tag{50}
$$

となるが,

$$
\begin{aligned}
\langle\mathbf{x}|\frac{1}{E-\hat{H}_0+i\epsilon}|\mathbf{y}\rangle &= \int d^3\mathbf{k}\langle\mathbf{x}|\frac{1}{E-\hat{H}_0+i\epsilon}|\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}|\mathbf{y}\rangle \\
&= \int d^3\mathbf{k}\langle\mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle\frac{1}{\frac{p^2}{2m}-\frac{\mathbf{k}^2}{2m}+i\epsilon}\langle\mathbf{k}|\mathbf{y}\rangle \\
&= 2m\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi\hbar)^3}\frac{1}{p^2-\mathbf{k}^2+i\epsilon}e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})} \\
&= 2mG^{(+)}(\mathbf{x}-\mathbf{y})
\end{aligned}
\tag{51}
$$

は散乱のグリーン関数なので

$$
\begin{aligned}
f^{(2)}(\mathbf{p}',\mathbf{p}) &= -8\pi^2\hbar m^2\int d^3\mathbf{x}d^3\mathbf{y}\langle\mathbf{p}'|\mathbf{x}\rangle V(\mathbf{x})G^{(+)}(\mathbf{x}-\mathbf{y})V(\mathbf{y})\langle\mathbf{y}|\mathbf{p}\rangle \\
&= -\frac{1}{4\pi\hbar^2}\int d^3\mathbf{x}d^3\mathbf{y}e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'\cdot\mathbf{x}}2mV(\mathbf{x})G^{(+)}(\mathbf{x}-\mathbf{y})2mV(\mathbf{y})e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{y}}
\end{aligned}
\tag{52}
$$

である．