では, 式 (5.8) が成立する条件はどのように表されるであろうか. その答えはいくつかの方法で得られるが, ここでは, アイコナール近似で得られた結果を利用して近似の成立条件を評価することにしよう. 式 (5.18) にラプラシアン $\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{R}}^2$ を作用させると,

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{R}}^2 \psi(b,z) &= \frac{1}{b}\frac{\partial}{\partial b}\psi(b,z) + \frac{\partial^2}{\partial b^2}\psi(b,z) + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\psi(b,z) \\
&= \frac{1}{i\hbar v}\left[\frac{\partial}{\partial z}U(R)\right]\psi(b,z) + \left[\frac{1}{i\hbar v}U(R)\right]^2\psi(b,z) \\
&+ \frac{1}{b}\left[\frac{1}{i\hbar v}\int_{-\infty}^{z}\frac{\partial}{\partial b}U(b,z')\,dz'\right]\psi(b,z) \\
&+ \left[\frac{1}{i\hbar v}\int_{-\infty}^{z}\frac{\partial^2}{\partial b^2}U(b,z')\,dz'\right]\psi(b,z) \\
&+ \left[\frac{1}{i\hbar v}\int_{-\infty}^{z}\frac{\partial}{\partial b}U(b,z')\,dz'\right]^2\psi(b,z)
\end{aligned} \tag{5.20}$$

となる. ここで式 (5.13) を用いた. 一方, 平面波については

$$\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{R}}^2 e^{iKz} = \frac{\partial^2}{\partial z^2}e^{iKz} = -K^2 e^{iKz} \tag{5.21}$$

である. ψ の変化量と平面波のそれとの比を

$$\mathfrak{D} = \left|\frac{\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{R}}^2\psi(b,z)}{\psi(b,z)}\right| \Big/ \left|\frac{\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{R}}^2 e^{iKz}}{e^{iKz}}\right| \tag{5.22}$$

と定義すると, $\mathfrak{D}$ の最大値は

$$\begin{aligned}
\mathfrak{D}_{\max} = \frac{1}{2EK}\left|\frac{\partial}{\partial z}U(R)\right| + \left(\frac{|U(R)|}{2E}\right)^2 + \frac{1}{2bEK}\left|\int_{-\infty}^{z}\frac{\partial}{\partial b}U(b,z')\,dz'\right| \\
+ \left[\frac{1}{2E}\int_{-\infty}^{z}\frac{\partial}{\partial b}U(b,z')\,dz'\right]^2 + \frac{1}{2EK}\left|\int_{-\infty}^{z}\frac{\partial^2}{\partial b^2}U(b,z')\,dz'\right|
\end{aligned} \tag{5.23}$$

で与えられる. ただし式 (5.14) より

$$\frac{1}{\hbar v}\frac{1}{K} = \frac{1}{\hbar^2 K^2/m} = \frac{1}{2E} \tag{5.24}$$

と書けることを利用した. 式 (5.23) の右辺を評価するにあたり, ポテンシャル U は長さ a のレンジをもち, その中で $|U|$ が U_0 から 0 まで変化すると考えると, 大雑把にいって

$$\left|\frac{\partial}{\partial z}U(R)\right| \sim \left|\frac{\partial}{\partial b}U(R)\right| \sim \frac{|U_0|}{a}, \quad \frac{\partial^2}{\partial b^2}U(b,z') \sim 0, \quad \left|\int_{-\infty}^{z}\frac{\partial}{\partial b}U(b,z')\,dz'\right| \sim |U_0| \tag{5.25}$$

であるから,

$$\mathfrak{D}_{\max} \sim 2\frac{|U_0|}{2E}\frac{1}{Ka} + 2\left(\frac{|U_0|}{2E}\right)^2 \tag{5.26}$$

となる. ただしここで, 式 (5.23) の右辺第 3 項を見積もる際に $b \sim a$ とした. これは, $b \ll a$ では吸収の効果によって散乱への寄与が小さくなり (5.3 節参照), 他方 $b \gg a$ ではポテンシャルそのものが無視できるためである. 式 (5.26) を 0 とみなすのがアイコナール近似であるから, その成立条件は

$$\frac{|U_0|}{2E} \ll 1 \tag{5.27}$$

および

$$\frac{1}{Ka} = \frac{\lambda}{a} \ll 1 \tag{5.28}$$

であることがわかる. ただし λ は第 4 章で導入した換算ド・ブロイ波長である. なお, 式 (5.26) から見てとれるように, <u>アイコナール近似で無視されているのは $|U_0|/(2E)$ および $1/(Ka)$ の **2 次**のオーダーである</u>ことに注意せよ.