並進対称性のある系では、$\rho^{(2)}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \rho^2 g(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ だから、

$$\langle \sum_{i\neq j} e^{i\Delta\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j)} \rangle = \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' e^{i\Delta\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r})} \rho^2 g(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \tag{13}$$

$\Delta\mathbf{r} = \mathbf{r}-\mathbf{r}'$ として、$\mathbf{r}' \to \Delta\mathbf{r}$ に変数変換

$$\begin{aligned} \langle \sum_{i\neq j} e^{i\Delta\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j)} \rangle &= \int d\mathbf{r} \int d\Delta\mathbf{r} e^{i\Delta\mathbf{k}\cdot\Delta\mathbf{r}} \rho^2 g(\Delta\mathbf{r}) && (14) \\ &= V \int d\Delta\mathbf{r} e^{i\Delta\mathbf{k}\cdot\Delta\mathbf{r}} \rho^2 \{h(\Delta\mathbf{r})+1\} && (15) \\ &= V\rho^2\{\tilde{h}(\Delta\mathbf{k}) + V\delta_{\Delta\mathbf{k},0}\} = N\rho\tilde{h}(\Delta\mathbf{k}) + N^2\delta_{\Delta\mathbf{k},0} && (16) \end{aligned}$$

$\tilde{h}(\Delta\mathbf{k})$ があらわれた。2項目は、$\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ のときにだけ寄与する前方散乱を表している。したがって、

$$\langle|\psi(\mathbf{r})|^2\rangle = \frac{1}{R^2}\{N + N\rho\tilde{h}(\Delta\mathbf{k}) + N^2\delta_{\Delta\mathbf{k},0}\} = \frac{N}{R^2}\{1+\rho\tilde{h}(\Delta\mathbf{k}) + N\delta_{\Delta\mathbf{k},0}\} \tag{17}$$

(17) 式の $\{\cdots\}$ の中で、前方散乱を除いた部分を静的構造因子といい、$S(\mathbf{k})$ とかく。

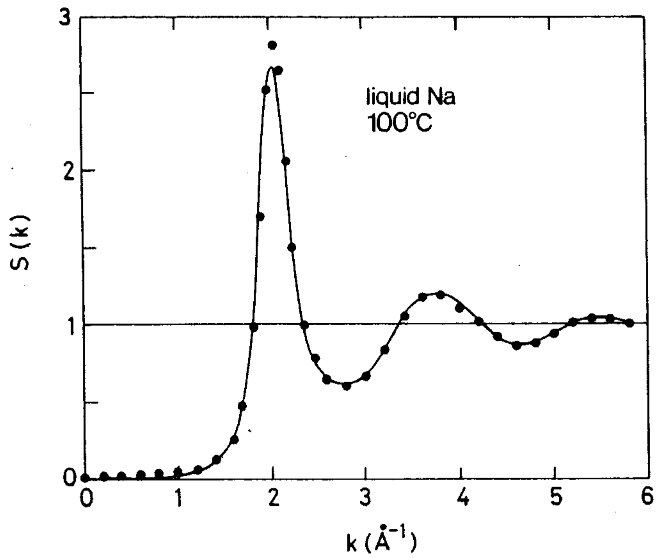
$$\boxed{S(\mathbf{k}) = 1+\rho\tilde{h}(\mathbf{k})} \tag{18}$$

1項目は、同じ粒子からの寄与で、2項目が違う粒子による干渉を表す。

前方散乱を無視すれば、

$$\langle|\psi(\mathbf{r})|^2\rangle = \frac{N}{R^2}S(\Delta\mathbf{k}) = \frac{N}{R^2}\{1+\rho\tilde{h}(\Delta\mathbf{k})\} \tag{19}$$

(3) 測定結果



3重点近くの液体ナトリウムの静的構造因子。点は、x線散乱による実験結果 (Greenfield ら 1971)。カーブは、r^{-4} のポテンシャルで計算したモンテカルロシミュレーション。
(Hansen-McDonald, P104)