# シュレーディンガー方程式の無次元化の非一意性と近似法
# －非調和振動子を例としてⅡ


新谷　明雲

山口県立大学　共通教育機構


# Non-uniqueness of Dimensionless Form of Schrödinger Equation and Corresponding Perturbations
# －Anharmonic Oscillator as an Example Ⅱ


Meiun SHINTANI

The General Education Division of Yamaguchi Prefectural University



## Abstract

In the former article we treated the Schrödinger equation for the anharmonic oscillator with the quartic term and find out three types of its dimensionless forms based on the dimensional analysis. The first one corresponds to the conventional perturbation, and the second yields the JWKB method, and the third seems to be different from the above two. In the present paper we focus ourselves to the third case and clalify the energy level and the wave function perturbatively. Consequently this case reproduces not only the same energy levels but also the same wave functions as those of the first case.



Key words: Schrödinger equation, anharmonic oscillator, dimensional analysis, dimensionless form of equation, logarithmic derivative method, perturbation method, JWKB method

キーワード：シュレーディンガー方程式、非調和振動子、次元解析法、方程式の無次元化、対数微分法、摂動法、JWKB法


## §１　はじめに

前稿では次元解析の一般論からポテンシャルにｘの４乗項が入った一次元非調和振動子のシュレーディンガー方程式の無次元化を試みた。我々はすでに通常の無次元化処方により得られた方程式を対数微分変換を通してリッカチ（Riccati）方程式に書き改め、この方程式に基づいた摂動論［１］を展開した。方程式の無次元化の処方はこれだけに尽きるわけではなく、さまざまな無次元化処方があり、それぞれの無次元化処方に応じた摂動法が可能である。特に、前稿では興味深いと思われる３つのケースについて到達した。Case Ⅰは結合定数“$\boldsymbol{g}$”の小さいところでのみ意味があり、Case Ⅱは、断熱不変量　$\boldsymbol{J}=\frac{\boldsymbol{E}}{\boldsymbol{\nu}}$　がプランク定数$\boldsymbol{h}$に比し十分大きいところで成り立つ展開である。すなわちJWKB法が古典近似と呼ばれるゆえんである。Case Ⅲはいまだかつて出遭ったことがないケースかもしれない。形式上の違いはあっても実質的にCase Ⅰと同じものであるかは、波動関数、エネルギー順位等を詳細に確かめることにより明確となる。本稿では、対数微分変換法による摂動論を展開しその類似点と相違点について明確にしたい。

## §２　次元解析によるシュレーディンガー方程式の無次元化―復習を兼ねて

次のシュレーディンガー方程式を考える。

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\,\omega_0^2\,x^2+\,g\,x^4\right)\psi(x)=E\,\psi(x) \quad (1)$$

この方程式に現れる諸量の次元行列（dimensional matrix）は、

$$
\begin{array}{c} \\ \mathrm{M} \\ \mathrm{L} \\ \mathrm{T} \end{array}
\begin{array}{c}
\begin{array}{cccccc} g & \omega_0 & m & \hbar & E & x \end{array} \\
\begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 2 & 2 & 1 \\ -2 & -1 & 0 & -1 & -2 & 0 \end{bmatrix}
\end{array}
\tag{2}
$$

である。ここで、M、L、Tはそれぞれ質量（mass）、距離（length）、時間（time）を表す。この行列の階数（rank）は３であるので、６－３＝３個の独立な無次元積（dimensionless product）が存在することが分かる。次に方程式(1)の無次元化は座標ｘの無次元化を通して行うのが最も容易である。そこで、

$$\eta = g^a \ \omega_0^b \ m^c \ \hbar^d \ E^e \ x \tag{3}$$

とおき、(2)を用いて無次元化座標$\eta$の次元解析をおこなうと、

$$[\eta] = M^{a+c+d+e} L^{-2a+2d+2e+1} T^{-2a-b-d-2e} \tag{4}$$

となる。$\eta$は無次元量であることから(4)式のM、L、Tの指数がそれぞれ零とならなければならない。即ち、次の連立方程式

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 2 & 1 & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{2} \\ 0 \end{pmatrix} \tag{5}$$

をうる。行列は階数が３なので不足系である。これが決定系になるには２個の独立な条件式が有ればよい。そこで、$\eta$を用いて方程式(1)を書き換えてみると、

$$
\begin{aligned}
\langle -\frac{d^2}{d\eta^2} &+ g^{-4a}\,\omega_0{}^{2-4b}\, m^{2-4c}\, \hbar^{-2-4d}\, E^{-4e}\, \eta^2 \\
&+ 2\, g^{1-6a}\, \omega_0{}^{-6b}\, m^{1-6c}\, \hbar^{-2-6d}\, E^{-6e}\, \eta^4 \rangle \tilde{\psi}(\eta) \\
&= 2\, g^{-2a}\, \omega_0{}^{-2b}\, m^{1-2c}\, \hbar^{-2-2d}\ \ E^{1-2e}\, \eta^4\, \tilde{\psi}(\eta)
\end{aligned}
\tag{6}
$$

となる。a≠０ととると、右辺のエネルギー項が$\eta^2$項、$\eta^4$項とともに結合定数g に依存するので、摂動展開を行うことが難しくなる。したがって、

$$a = 0 \tag{7}$$

と取ることが自然である。連立方程式(4)の付加条件として次の３つの場合

CaseⅠ：ａ＝ｅ＝０、CaseⅡ：ａ＝ｄ＝０、
CaseⅢ：ａ＝ｂ＝０

について考えよう。ここでａ＝ｃ＝０の付加条件は方程式の間に矛盾をもたらすことを指摘しておく。CaseⅠ：ａ＝ｅ＝０は通常の摂動展開に対応し、CaseⅡ：ａ＝ｄ＝０はJWKB法に対応する。これらについての詳細は、付録を参照されたい。われわれが興味あるのはCaseⅢ：ａ＝ｂ＝０である。以下ではこの場合に議論を集中し基底状態のエネルギー順位および波動関数を求めることにする。

## §３　基底状態の摂動論－エネルギーおよび波動関数

### ３．１　CaseⅢ：ａ＝ｂ＝０の摂動論

ａ＝ｂ＝０の条件のもとに方程式(4)を解いて

$$\boldsymbol{c = {}^{1}/_{2}\ ,\ d = -\ 1,\ e = {}^{1}/_{2}\ ,} \tag{8}$$

$$\boldsymbol{\eta\ = \frac{\sqrt{mE}}{\hbar}\ x} \tag{9}$$

をうる。したがって、無次元化された方程式は

$$\boldsymbol{\langle -\ \frac{d^2}{d\eta^2}\ +\ \lambda\,\eta^2\ +\ 2\,G\,\eta^4\,\rangle\,\tilde{\psi}(\eta)\ \ =\ 2\,\tilde{\psi}(\eta)} \tag{10}$$

となる。ここでλ，Ｇは無次元パラメータで

$$\boldsymbol{\lambda = (\frac{\hbar\,\omega_0}{E})^2\ ,\ \ G\ =\ \frac{g\ \ \hbar^4}{m^2E^3}} \tag{11}$$

とおいた。摂動解を求めために、

$$\boldsymbol{T(\eta) = \frac{1}{\tilde{\psi}(\eta)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\,\eta}\ \ \tilde{\psi}(\eta)\ ,} \tag{12}$$

とおけば、Ｔ（$\eta$）は次のリッカチ方程式

$$\boldsymbol{T^2(\eta) + T'(\eta) - \lambda\,\eta^2 - 2\,G\,\eta^4 + 2 = 0} \tag{13}$$

を満たす。Ｔ（$\eta$）の摂動解を求めるために

$$\boldsymbol{T(\eta)\ =\ \sum_{n=0}^{\infty} G^n\ \ T_n(\eta)\ ,\ \ \lambda = \sum_{n=0}^{\infty} G^n\ \lambda_n,} \tag{14}$$

とおき、$\boldsymbol{T_n(\eta)}$，$\boldsymbol{\lambda_n}$ を低次から逐次求めればよい。それにより波動関数 $\boldsymbol{\tilde{\psi}(\eta)}$ もＧの冪展開で逐次求まる。このあたりの解の求め方は論文［１］に同じである。

具体的に、基底状態に対し具体的に摂動論をＧ$^4$まで行うと

$$\boldsymbol{\lambda = 4 - \frac{3}{2}\ G + \frac{15}{64}\ G^2 - \frac{45}{256}\ G^3\ + \frac{7395}{2^{15}}\ G^4 + \ O\left(G^5\right)\ ,} \tag{15}$$

$$
\boldsymbol{
\begin{aligned}
T(\eta) = -2\eta - \frac{3}{2} G\,\eta^3\ &+ G^2\left(\frac{1}{16}\eta^5 + \ \frac{5}{64}\ \eta^3\right) - G^3\ \left(\frac{1}{64}\eta^7 + \frac{3}{64}\eta^5 + \frac{15}{128}\eta^3\right) \\
&+ \frac{1}{2^{15}}\ G^4\left(160\,\eta^9 + 824\,\eta^7 + 1972\,\eta^5 + 2465\,\eta^3\right) + O(G^5\ )\ ,
\end{aligned}
}
\tag{16}
$$

となる。

### ３．２　基底状態のエネルギー固有値

ここでは、(15)式で求めたλ固有値をエネルギー固

有値Ｅに翻訳する作業を行うこととする。
⒂式に $\lambda$，Ｇを代入して、

$$4E^2=(\hbar\,\omega_0)^2+\frac{3}{2}\frac{g\ \hbar^4}{m^2E}-\frac{15}{64}\frac{g^2\,\hbar^8}{m^4E^4}+\frac{45}{256}\frac{g^3\,\hbar^{12}}{m^6E^7}-\frac{7395}{2^{15}}\frac{g^4\,\hbar^{16}}{m^8E^{10}}+O(g^5)\,, \tag{17}$$

この式からエネルギーを求める際に、右辺分母にもＥの冪が入っていることに注意する。ｎ次のエネルギー $E_n$ を求めるためには、逐次代入法を使えばよい。そのために、⒄式を次のように書き改める。

$$4{E_n}^2=(\hbar\,\omega_0)^2+\frac{3}{2}\frac{g\ \hbar^4}{m^2E_{n-1}}-\frac{15}{64}\frac{g^2\,\hbar^8}{m^4E_{n-2}^4}+\frac{45}{256}\frac{g^3\,\hbar^{12}}{m^6E_{n-3}^7}-\frac{7395}{2^{15}}\frac{g^4\,\hbar^{16}}{m^8E_{n-4}^{10}}+\ \dots\ +C\,\frac{g^n\,\hbar^{4n}}{m^{2n}\,E_0^{2n+1}} \tag{18}$$

ここで、Ｃは、ｇのｎ次の係数を表す。$E_0$, $E_1$, $E_2\cdots$, $E_{n\text{-}1}$ まで求まれば、$E_n$ は⒅式より求まる。結果は、以下のようになる。

$$E_4=\frac{\hbar\,\omega_0}{2}\left(1+\frac{3}{4}G_1-\frac{21}{16}G_1^2+\frac{333}{64}G_1^3-\frac{30885}{1024}G_1^4\right),$$

$$G_1=\ \frac{2g\hbar}{m^4{\omega_0}^3}\,, \tag{19}$$

この結果は摂動の４次までで、文献［１］のものに見事に一致する。

### ３．３　基底状態の波動関数

この節では、規定上態の波動関数を求めることとしよう。$\tilde{\Psi}(\eta)$ の摂動展開するために

$$\tilde{\psi}(\eta)=\sum_{n=0}^{\infty}G^n\ \tilde{\psi}_n(\eta) \tag{20}$$

とおいて、式⑿に代入すれば、Ｇの各次数で以下の等式が成り立つ。

$$\begin{aligned}
&T_0(\eta)\tilde{\psi}_0(\eta)=\frac{d}{d\eta}\ \tilde{\Psi}_0(\eta)\,,\\
&T_0(\eta)\tilde{\psi}_1(\eta)+T_1(\eta)\tilde{\psi}_0(\eta)=\frac{d}{d\eta}\,\tilde{\psi}_1(\eta)\,,\\
&T_0(\eta)\tilde{\psi}_2(\eta)+T_1(\eta)\tilde{\psi}_1(\eta)+T_2(\eta)\tilde{\psi}_0(\eta)=\frac{d}{d\eta}\,\tilde{\psi}_2(\eta)\,,\\
&T_0(\eta)\tilde{\psi}_3(\eta)+T_1(\eta)\tilde{\psi}_2(\eta)+T_2(\eta)\tilde{\psi}_1(\eta)+T_3(\eta)\tilde{\psi}_0(\eta)=\frac{d}{d\eta}\,\tilde{\psi}_3(\eta)\,,\\
&\cdots
\end{aligned} \tag{21}$$

これらの式に、⒃の各 $T_i(\eta)$ の表現を代入して、$\tilde{\psi}_0(\eta),\tilde{\psi}_1(\eta),\tilde{\psi}_2(\eta)\cdots$ が以下のように逐次求められる。

$$\begin{aligned}
\tilde{\psi}_0(\eta)&=\left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\eta^2},\\
\tilde{\psi}_1(\eta)&=\frac{3}{64\,2^{\frac{3}{4}}\,\pi^{\frac{1}{4}}}\,e^{-\eta^2}-\frac{\eta^4}{4\,2^{\frac{3}{4}}\,\pi^{\frac{1}{4}}}\,e^{-\eta^2}\\
\tilde{\psi}_2(\eta)&=-\frac{287}{16384\,2^{\frac{3}{4}}\,\pi^{\frac{1}{4}}}\,e^{-\eta^2}+\frac{\left(\frac{17}{2}\eta^4+\frac{16}{3}\eta^6+4\,\eta^8\right)}{256\,2^{\frac{3}{4}}\,\pi^{\frac{1}{4}}}\,e^{-\eta^2}
\end{aligned} \tag{22}$$

ただし、規格化条件

$$\langle\tilde{\psi}_{\hbar}(\eta)|\tilde{\psi}_0(\eta)\rangle=\delta_{\hbar,0} \tag{23}$$

を用いた。さらに、式⑼を用い、変数ｘで表せば、もとめる波動関数が得られる。

## §４　議論と展望

基底状態についてのみではあるが、本節の結果と、通常の摂動論（CaseⅠ：ａ＝ｅ＝０）の導く結果を比較検討しよう。

まず、エネルギースペクトルについて摂動の４次までで、両者全く同じ結果に至った。
次に、波動関数についてであるが、$\tilde{\psi}_0(\eta)$ については同じ結果になるが、$\tilde{\psi}_1(\eta),\tilde{\psi}_2(\eta)$ は一見異なるように見える。しかし、変数 $\eta$ がエネルギーＥで表されるので、再度Ｇについての冪展開を考慮に入れると、通常の摂動論と全く同じ結果が再現されるのである。CaseⅢの利点が有るとすれば一体何だろうか、今のところ何度も冪展開を行わなければならないという意味で計算が煩雑であり、利点らしきものは見当たらない。がしかし、同じ結論が別の摂動論でもたらされるということそれ自体が十分面白いと言えないだろうか。

次の課題は基底状態のみならず励起状態についても比較検討することが必要である。

また、CaseⅡの場合において具体的に、（例えば、相互作用に $x^2$ 項が無く、$x^4$ 項のみからなるハミルトニアンについて）摂動論を展開し、通常の結論を再現できるかを示してみることは価値がないわけではない。

## 参考文献

［１］M. Shintani, Bulletin of Yamaguchi Prefectural University, Faculty of Human Life Sciences（山口県立大学生活科学部研究報告）, vol.26（2000）39-42.
［２］M. Shintani, Bulletin of Yamaguchi Prefectural University（山口県立大学学術情報第４号（共通教育機構紀要第２号））,vol.4（2011）41-43.
［３］例えば、シッフ「量子力学」吉岡書店（1969年）

## 付　録

CaseⅠおよびCaseⅡの導出

CaseⅠ：ａ＝ｅ＝０

この条件のもとに方程式⑷を解いて

$$b=c={}^{1}\!/_{2}\ ,\ d=-{}^{1}\!/_{2}\,, \tag{a-1}$$

$$\eta = \sqrt{\frac{m\,\omega_0}{\hbar}}\;x \qquad \text{(a-2)}$$

をうる。したがって、無次元化された方程式は

$$\langle -\frac{d^2}{d\eta^2} + \eta^2 + G\,\eta^4 \rangle \tilde{\psi}(\eta) = \lambda\,\tilde{\psi}(\eta) \qquad \text{(a-3)}$$

であたえられる。ここでG、$\lambda$は無次元パラメータで

$$\mathrm{G} = \frac{2\,\mathrm{g}\,\hbar}{\mathrm{m}^2{\omega_0}^2}\ ,\ \lambda = \frac{2\,\mathrm{E}}{\hbar\,\omega_0} \qquad \text{(a-4)}$$

と定義した。Gの冪で摂動展開するのが通常の摂動論である。我々は（a-3）に対し対数微分変換

$$\mathrm{T}(\eta) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\,\eta}\ \ln\tilde{\psi}(\eta)$$

をおこなうことにより次のリッカチ方程式

$$T^2(\eta) + T'(\eta) - \eta^2 - G\,\eta^4 + \lambda = 0\,, \qquad \text{(a-5)}$$

に至る。この方程式の摂動解はGについての冪展開

$$T(\eta) = \textstyle\sum_{n=0}^{\infty} G^n\ T_n(\eta)\ , \qquad \lambda = \sum_{n=0}^{\infty} G^n\,\lambda_n \qquad \text{(a-6)}$$

を通しておこなわれた［１］。

<u>CaseⅡ：ａ＝ｄ＝０</u>

この条件のもとに方程式⑷を解いて

$$b = 1\,,\ c = {}^{1}\!/_{2}\ \ ,\ e = -{}^{1}\!/_{2} \qquad \text{(a-7)}$$

$$\eta = \omega_0\sqrt{\frac{m}{E}}\ x\,, \qquad \text{(a-8)}$$

をうる。したがって、無次元化された方程式は

$$\langle -\epsilon^2\,\frac{d^2}{d\eta^2} + \eta^2 + G\,\eta^4 \rangle \tilde{\psi}(\eta) = 2\,\tilde{\psi}(\eta) \quad 、 \qquad \text{(a-9)}$$

であたえられる。ここで $\epsilon$, Gは無次元パラメータで

$$\epsilon = \frac{\hbar\,\omega_0}{E}\ ,\ G = \frac{2\,E}{m^2{\omega_0}^2}\ g \qquad \text{(a-10)}$$

と定義した。Gの大小によらず、$\epsilon$の冪で摂動展開を行うことができる。これはプランク定数　についての摂動論であり、これはまさしくJWKB法［３］として知られるものに他ならない。具体的には、

$$\tilde{\psi}(\eta) = exp\left(\frac{\phi(\eta)}{\epsilon}\right)\ ,\ T(\eta) = d\phi(\eta)/d\eta\,, \qquad \text{(a-11)}$$

とおけば、T（$\eta$）は次のリッカチ方程式

$$T^2(\eta) + \epsilon\,T'(\eta) - \eta^2 - G\,\eta^4 + 2 = 0\,, \qquad \text{(a-12)}$$

を満たす。T（$\eta$）の摂動解を求めるために

$$T(\eta) = \textstyle\sum_{n=0}^{\infty} \epsilon^n\ T_n(\eta) \qquad \text{(a-13)}$$

とおき、Tn（$\eta$）を低次から逐次求めればよい。それにより波動関数も逐次求まる。