シュレーディンガー方程式の対数微分法による厳密解の探索
—デルタ型ポテンシャルへの応用

山口県立大学 共通教育機構
新谷　明雲

キーワード：シュレーディンガー方程式、対数微分法、リッカチ方程式、デルタ関数ポテンシャル、厳密解、束縛状態、散乱状態

Exact Solutions of Schrödinger Equation based on the Logarithmic Derivative Method
—The δ-type Potential as an Example

Meiun　SHINTANI
The General Education Division of Yamaguchi Prefectural University

Abstract

On the basis of the method in terms of logarithmic derivative of wave function, we search for exact solutions of the stationary Schrödinger equation with the δ-type potential.

Key words: Schrödinger equation, logarithmic derivative, Riccati equation, delta function potential, exact solution, bound state, scattering state

§１　はじめに

我々は対数微分変換によりシュレーディンガー方程式を非線形１階微分方程式である*Riccati* 方程式に変換し、その方程式の摂動論を展開することによりシュレーディンガー方程式の摂動解を間接的に求めた［1］［2］［3］。この稿では、シュレーディンガー方程式の厳密解を直接求める代わりに、*Riccati* 方程式の厳密解を求めることにより、間接的にシュレーディンガー方程式の厳密解を求めることにある。方程式の階数が下がることと方程式が非線形であることが厳密解の探索を容易にする。非線形性はデメリットではなくむしろメリットとみなすことができる。ここではその一例としてデルタ型ポテンシャルの場合にこのことを示す。

空間一次元で一体のシュレーディンガー方程式のポテンシャルがデルタ関数であたえられるときにその厳密解はよく知られている。斥力的な場合には散乱解が、引力的な場合には束縛状態１個に対応する解と散乱解があることが知られている。この稿ではその解の求積を対数微分変換による方法で再訪する。

即ち、デルタ型ポテンシャルをもった次のシュレーディンガー方程式出発する。

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{\hbar^2}{m}\Omega\delta(x)\right\}\varphi(x) = E\varphi(x) \tag{1-1}$$

ここで、パラメータΩの符号が正ならば斥力に、負ならば引力に対応する。この方程式を次の変換（logarithmic derivative transformation）

$$\varphi(x) \to T(x) = \frac{d}{dx}ln\varphi(x) \tag{1-2}$$

した量$T(x)$に対する方程式とみたてると、*Riccati* 方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d}{dx}T(x)+T(x)^2\right)+\frac{\hbar^2}{m}\Omega\delta(\mathrm{x}) = E \tag{1-3}$$

に到達する。一般に波動関数はC^1級であるが、ここではデルタ関数ポテンシャルの存在のため、$x=0$

で波動関数φ(x) の連続性は成り立つがその一階の微係数は不連続となることが知られている。そのため (1-2) 式で導入した関数 $T(x)$ の連続性はそこでは成り立たない。

$x=0$での接続条件は、式 (1-3) の両辺を $(-\varepsilon,\varepsilon)$ にわたり積分すると、

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\{T(\varepsilon)-T(-\varepsilon)\}+\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}dx\,T(x)^2\right]+\frac{\hbar^2}{m}\Omega = 2\varepsilon E, \quad (1\text{-}4)$$

となる。$\varepsilon\to 0$ 極限で、$|T(x)|$ は有界であるので積分項は0となる。したがって、接続条件は、

$$T(+0)-T(-0) = 2\Omega\,, \quad (1\text{-}5)$$

となる。

$x\neq 0$ ではRiccati 方程式 (1-3) は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d}{d\,x}T(x)+T(x)^2\right) = E \quad (1\text{-}6)$$

となり、定数解は２個あり、それらをT_1, T_2と書けば

$$T_1(x)=\frac{1}{\hbar}\sqrt{-2mE}\,,\ T_2(x)=-\frac{1}{\hbar}\sqrt{-2mE}\,, \quad (1\text{-}7)$$

であたえられる。これに対応する波動関数φ_1(x), φ_2(x) は

$$\varphi_i(x)=C_i exp\left[\int^x dx\ T_i(x)\right],(\mathrm{i}=1,2,\ \mathrm{C_i}\text{は積分定数}), \quad (1\text{-}8)$$

であたえられる。Riccati 方程式の２つの特殊解T_1, T_2から作られる第３の解 $T(x)$ は公式 [4] によれば

$$T(x)=\frac{T_1(x)-C_0\,exp\left[\int^x dx\,\{T_1(x)-T_2(x)\}\right]\,T_2(x)}{1-C_0\ exp\left[\int^x dx\,\{T_1(x)-T_2(x)\}\right]}\ ,(\mathrm{C_0}\text{は積分定数}), \quad (1\text{-}9)$$

であたえられる。これを式 (1-8) で定義される波動関数$\varphi_1(x)$, $\varphi_2(x)$ を用いて書けば、

$$T(x)=\frac{d}{dx}ln\{\varphi_1(x)-C_0\,\varphi_2(x)\}=\frac{d}{dx}ln\,\varphi(x), \quad (1\text{-}10)$$

となる。式 (1-10) は第３の解 $T(x)$ に対応する波動関数 $\varphi(x)$ が特殊解$\varphi_1(x)$, $\varphi_2(x)$ の線形結合であるということであり、線形微分方程式 (1-1) の重ね合わせの原理をあらわす。すなわち、一般性を失わずに$C_0=-1$と選べば、

$$\varphi(\mathrm{x})=\varphi_1(\mathrm{x})+\varphi_2(\mathrm{x}), \quad (1\text{-}11)$$

も解である。次に、Riccati方程式 (1-3) の解 (1-10) を接続条件 (1-5) のもとで決定する。そのために方程式 (1-3) をΩの正負、Eの正負に応じた４通りについて考えよう。すなわち、*Ia* : $\Omega>0$, $E>0$, *Ib* : $\Omega>0$, $E<0$, *IIa* : $\Omega<0$, $E>0$, *IIb* : $\Omega<0$, $E<0$ の場合について次章で議論する。

§２　解の決定

<u>*Ia* : $\Omega>0$, $E>0$ の場合</u>

斥力ポテンシャル ($\Omega>0$) の下で散乱解 ($E>0$) が存在するかを見ることである。$x\neq 0$での定数解 (1-7) は

$$T(x)=\pm ik,\ (k\equiv\sqrt{2mE}\,/\hbar)\,, \quad (2\text{-}1)$$

となる。

$$T_1(x)=+ik,\quad T_2(x)=-ik \quad (2\text{-}2)$$

とおけば、$x<0$では

$$T(x)=\frac{ik-C_0\ exp\left(\frac{2i}{\hbar}px\right)(-ik)}{1-C_0\ exp(2ikx)}=(ik)\frac{C_1exp(ikx)-C_2\,exp(-ikx)}{C_1exp(ikx)+C_2\,exp(-ikx)}$$

$$=\frac{d}{dx}ln\{C_1exp(ikx)+C_2\,exp(-ikx)\}. \quad (2\text{-}3)$$

ここで$C_0=-C_1/C_2$とおいた。式 (2-3) は波動関数$\varphi(x)$ が$x<0$で

$$\varphi(x)=C_1\,exp(ikx)+C_2\,exp(-ikx)\,, \quad (2\text{-}4)$$

であたえられることを示す。いま、x軸の負の方向から正の方向に進む波を考えるとき、$x<0$では、(2-3)、(2-4) で、$C_1=1$と取ればよい。一方、$x>0$では、正の方向に進む波のみを考えればよいので、

$$T(x)=+ik\,,\ \varphi(x)=C_3\,exp(ikx)\,, \quad (2\text{-}5)$$

となる。接続条件 (1-5) より、

$$C_2=\frac{\Omega}{ik-\Omega}\ . \quad (2\text{-}6)$$

が決まる。C_3は波動関数の$x=0$における連続性より、

$$C_3=\frac{ik}{ik-\Omega}\ . \quad (2\text{-}7)$$

としてもとまる。

以上まとめると、この場合つぎの散乱解

$$\varphi(x)=exp(ikx)+\frac{\Omega}{ik-\Omega}exp(-ikx)\,,\qquad x<0\,,$$

$$=\frac{ik}{ik-\Omega}exp(ikx)\,,\qquad x>0\,, \quad (2\text{-}8)$$

をうる。散乱解がもつエネルギーは

$$E=\frac{(\hbar k)^2}{2m}, \quad (2\text{-}9)$$

で、反射係数 R、透過係数 T はそれぞれ

$$R=\frac{\Omega}{ik-\Omega}\,,\ T=\frac{ik}{ik-\Omega}, \quad (2\text{-}10)$$

あたえられ、

$$|R|^2+|T|^2=1\,. \quad (2\text{-}11)$$

を満たしている。

<u>*Ib* : $\Omega>0$, $E<0$ の場合</u>

この場合、$E<0$であるので

$$T_1(x)=\kappa\,,\ T_2(x)=-\kappa\,,(\kappa\equiv\sqrt{-2mE}/\hbar,\ \kappa>0)\ , \quad (2\text{-}12)$$

となり、
一方、接続条件（1-5）より、

$$-\kappa = \Omega > 0, \tag{2-13}$$

となるので矛盾する。したがってこの場合には解は存在しない。このことは、斥力ポテンシャル下で束縛状態の解が存在しないことを意味する。

<u>*IIa*：Ω<0, E<0 の場合</u>

この場合は、引力ポテンシャル下で散乱解が存在するか見ることになる。Ωが負ということで*Ia*：Ω>0, E>0の場合と解は全く同じになる。

$$\varphi(x) = exp(ikx) - \frac{|\Omega|}{ik+|\Omega|}exp(-ikx)\,, \qquad x<0\,,$$

$$= \frac{ik}{ik+|\Omega|}exp(ikx)\,, \qquad x>0\,. \tag{2-14}$$

エネルギー E、反射係数R、透過係数Tに対し、(2-9)、(2-10)、(2-11）がそれぞれ成り立っている。

<u>*IIb*：Ω<0, E<0 の場合</u>

この場合、E< 0 であるので

$$T_1(x) = \kappa\,, T_2(x) = -\kappa\,, (\kappa \equiv \sqrt{-2mE}/\hbar\,,\ \kappa > 0)\,, \tag{2-15}$$

となる。一方、接続条件（1-5）より、

$$-\kappa = \Omega\,, \tag{2-16}$$

である。したがって、解は全域で

$$T(x) = -|\Omega|\,\epsilon(x)\,, \tag{2-17}$$

とあらわされる。ここで、関数$\epsilon(x)$は階段関数$\theta(x)$を用い

$$\epsilon(x) = \theta(x) - \theta(-x)$$

であたえられる。対応する波動関数はx< 0 では、$\varphi_1(x)$、x> 0 では$\varphi_2(x)$ 即ち、

$$\varphi(x) = \varphi_1(x) = \sqrt{\frac{|\Omega|}{2}}\,exp(|\Omega|\,x), \qquad x<0,$$

$$= \varphi_2(x) = \sqrt{\frac{|\Omega|}{2}}\,exp(-|\Omega|\,x),\ x>0\,, \tag{2-18}$$

となる。また、束縛状態のエネルギーは

$$E = -\frac{\hbar^2\Omega^2}{2m}\ (<0), \tag{2-19}$$

であたえられる。

§３　おわりに

この稿では、デルタ型ポテンシャルの場合における結果を対数微分法に基づき再導出を試みた。Ωの値が正のものと負のものがひとつの表式（2-8）で示されることは特に驚くことではない。というのは、この二つのポテンシャルは超対称ポテンシャルのスーパー・パートナーをなすからである［5］。超対称ポテンシャルの一般論として、エネルギー・スペクトルは基底状態を除き完全に一致し位相のずれ（phase shift）も等しい。今の場合束縛状態はたった一個であり、あとは連続スペクトルをもつ散乱解があるのみである。したがって散乱解が一致するのは当然といえる。

波動関数の一階微分不連続性$\varphi'(+0) - \varphi'(-0) = 2\Omega\varphi(0)$、ないしは $T(x)$ の不連続性（1-5）の発生は、特別なことではなく次のようにして理解できる。デルタ関数を滑らかな関数$f_a(x)$

$$f_a(x) = \frac{a}{2}\,sech^2 ax\,, (a>0) \tag{3-1}$$

の $a\to+\infty$極限ととらえるとき、*Riccati* 方程式（1-3）の代わりに次の方程式、

$$\frac{d}{dx}T(x) + T(x)^2 - 2\,\Omega\,f_a(x) = -2mE/\hbar^2, \tag{3-2}$$

を考えればよい。この方程式の解はΩ< 0 に対し

$$T(x) = -A\ tanh\,ax\,,\ A = \frac{-a+\sqrt{a^2-4\Omega a}}{2}\,, \tag{3-3}$$

として容易に求められる。波動関数およびエネルギーはそれぞれ、

$$\varphi(x) = (sech\,ax)^{A/a}, \tag{3-4}$$

$$E = -\frac{\hbar^2A^2}{2m}\,, \tag{3-5}$$

で与えられる。$a\to+\infty$極限で$A\to-\Omega$となり、*IIb*：Ω<0, E<0の結果が再現される。ここで注意すべき点は、（3-3）の $T(x)$ は a 値が有限である限り連続関数であるが、$+\infty$極限で$tanhax \to \epsilon(x)$ となり $T(x)$に不連続性が発生すること、である。同様の議論は散乱解においてもなされうる。

ここでは一個のデルタ関数の場合であったが、これが等間隔で複数個配置する場合（comb-type potential）に対しても拡張可能であると期待できる。これら以外のモデル（例えば、モースポテンシャルなど）や滑らかでないポテンシャル族に対しても我々の方法が有効であることを、稿を改めて紹介したい。

References

［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, Faculty of Human Life Sciences（山口県立大学生活科学部研究報告）, vol.27（2001）39-42.
[3] 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.30 (2004) 29-45.
[4] 例えば, 数学辞典第２版 (日本数学会編, 岩波書店, 1979年) 付録公式集14常微分方程式Ⅰ. 求積法Ⅰ). 常微分方程式V) ～Vii)
[5] L.J. Boya, Supersymmetric Quantum Mechanics: Two Simple Examples, DFTUZ 86.3