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

新谷　明雲
山口県立大学 共通教育機構

Non-uniqueness of Non-dimensional Form of Schrödinger Equation and Corresponding Perturbations
― Anharmonic Oscillator as an Example

Meiun SHINTANI
The General Education Division of Yamaguchi Prefectural University

Abstract

We treat the Schrödinger equation for the anharmonic oscillator with the quartic term and find out three types of its non-dimensional forms based on the dimensional analysis. The first one corresponds to the conventional perturbation, and the second yields the JWKB method, and the third appears to be different from the two and may bring us a new viewpoint in quantum physics.

Key words: Schrödinger equation, anharmonic oscillator, dimensional analysis, non-dimensional 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

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る。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。本稿では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ことを示したい。特に、古典近似としてのJWKB法［2］が、プランク定数$\hbar$に比例するパラメータについての摂動論とみなしうることが自然に導かれる。また上記のそれらとは異なる新しいタイプの無次元化シュレーディンガー方程式が導出されうることを示し、この方程式の摂動論について対数微分法を用い論ずることとする。

§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

次のシュレーディンガー方程式を考える。

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

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

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

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η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。η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、ηを用いて方程式 (1) を書き換えてみると、

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

となる。$a \neq 0$ととると、右辺のエネルギー項がη^2項、η^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

case Ⅰ: 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。

case Ⅰ : a ＝ e ＝ 0

この条件のもとに方程式 (4) を解いて

$$b = c = 1/2\ ,\ d = -1/2\ , \tag{8}$$

$$\eta = \sqrt{\frac{m\,\omega_0}{\hbar}}\,x \tag{9}$$

をうる。したがって、無次元化された方程式は

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

であたえられる。ここでG、λは無次元パラメータで

$$G = \frac{2\,g\,\hbar}{m^2\omega_0{}^2}\ ,\ \lambda = \frac{2\,E}{\hbar\,\omega_0} \tag{11}$$

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 (10) に対し対数微分変換

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

をおこなうことにより次のリッカチ方程式

$$T^2(\eta) + T'(\eta) - \eta^2 - G\,\eta^4 + \lambda = 0\,, \tag{12}$$

に至る。この方程式の摂動解はGについての冪展開

$$T(\eta) = \sum_{n=0}^{\infty} G^n\ T_n(\eta)\,,\qquad \lambda = \sum_{n=0}^{\infty} G^n\,\lambda_n \tag{13}$$

を通しておこなわれた [1]。

caseⅡ : a ＝ d ＝ 0

この条件のもとに方程式 (4) を解いて

$$b = 1\,,\ c = 1/2\ ,\ e = -1/2 \tag{14}$$

$$\eta = \omega_0\sqrt{\frac{m}{E}}\ x\,, \tag{15}$$

をうる。したがって、無次元化された方程式は

$$\langle -\epsilon^2\frac{d^2}{d\eta^2} + \eta^2 + G\,\eta^4 \rangle\,\tilde{\psi}(\eta) = 2\,\tilde{\psi}(\eta)\ , \tag{16}$$

であたえられる。ここでϵ、Gは無次元パラメータで

$$\epsilon = \frac{\hbar\,\omega_0}{E}\ ,\ G = \frac{2\,E}{m^2\omega_0{}^2}\ g \tag{17}$$

と定義した。Gの大小によらず、ϵ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$\hbar$についての摂動論であり、これはまさしくJWKB法 [2] として知られるものに他ならない。具体的には、

$$\tilde{\psi}(\eta) = \exp\ \left(\frac{\phi(\eta)}{\epsilon}\right)\,,\qquad T(\eta) = d\phi(\eta)/d\eta\,, \tag{18}$$

とおけば、T(η) は次のリッカチ方程式

$$T^2(\eta) + \epsilon\,T'(\eta) - \eta^2 - G\,\eta^4 + 2 = 0\,, \tag{19}$$

を満たす。T（η）の摂動解を求めるために

$$T(\eta) = \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon^n \ T_n(\eta) \tag{20}$$

とおき、Tn（η）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。このあたりは稿を改めて詳述することとする。

<u>caseⅢ: a = b = 0</u>

同様にこの条件のもとに方程式（4）を解いて

$$c = 1/2 \ , d = -1, \ e = 1/2 \tag{21}$$

$$\eta = \frac{\sqrt{mE}}{\hbar} x \tag{22}$$

をうる。したがって、無次元化された方程式は

$$\left(-\frac{d^2}{d\eta^2} + \lambda\eta^2 + 2G\eta^4\right)\tilde{\psi}(\eta) = 2\tilde{\psi}(\eta) \ , \tag{23}$$

であたえられる。ここでλ、Gは無次元パラメータで

$$\lambda = \left(\frac{\hbar\omega_0}{E}\right)^2 , \ G = \frac{g\,\hbar^4}{m^2E^3} \tag{24}$$

と定義した。摂動解を具体的に求めるには、

$$T(\eta) = \frac{d}{d\eta} \ln\tilde{\psi}(\eta) , \tag{25}$$

とおけば、T（η）は次のリッカチ方程式

$$T^2(\eta) + T'(\eta) - \lambda\eta^2 - 2G\eta^4 + 2 = 0 , \tag{26}$$

を満たす。T（η）の摂動解を求めるために

$$T(\eta) = \sum_{n=0}^{\infty} G^n \ T_n(\eta) , \ \lambda = \sum_{n=0}^{\infty} G^n \lambda_n , \tag{27}$$

とおき、T_n（η），λ_nを低次から逐次求めればよい。それにより波動関数$\tilde{\psi}$（η）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^3まで行うと

$$\lambda = 4 - \frac{3}{2}G + \frac{15}{64}G^2 - \frac{45}{128}G^3 + O(G^4) , \tag{28}$$

$$\begin{aligned} T(\eta) = & -2\eta - \frac{3}{2}G\eta^3 + G^2\left(\frac{1}{16}\eta^5 + \frac{5}{64}\eta^3\right) \\ & - G^3\left(\frac{1}{64}\eta^7 + \frac{3}{64}\eta^5 + \frac{15}{128}\eta^3\right) + O(G^4) , \end{aligned} \tag{29}$$

となる。これより波動関数およびエネルギー固有値が逐次求まるがこれがCaseⅠのものに一致するかの検証は今後に委ねることとしたい。

§３　おわりに

量子力学の教科書を見るに方程式の無次元化が一意的であるとつい思ってしまいがちであるが、本稿で示した様に実のところ無次元化された方程式は無数に存在しうるのである。が、そのうち物理的に意味のある方程式はかなり少なくなると言える。我々は本校で３つのケースに行きついた。CaseⅠは結合定数ｇの小さいところでのみ意味があり、CaseⅡは、断熱不変量J $=\frac{E}{\nu}$ がプランク定数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。CaseⅢがその二つのケースと一致するかを見ることは極めて興味深い問題と言える。もしそれらと異なるものを与えるとなるとそれは一体どのような近似を、言葉を変えてみれば一体いかなる視座を我々に提供するのであろうか、考察に値すると思慮される。

謝辞

本稿は平成21年12月に熊本大学理学部でおこなった「数理物理学」の講義録をもとに作成したものである。ここに貴重な機会を与えていただいた熊本大学の関係教職員に感謝の意を表したい。特に場の量子論と次元降下にまつわる有益な情報をもたらし、また実りある議論のひと時を共有していただいた矢嶋哲准教授に深く感謝する

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］ 例えば、シッフ「量子力学」吉岡書店（1969年）