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 —冪型ポテンシャルを持つ非調和振動子

新谷　明雲
山口県立大学 共通教育機

Non-uniqueness of Non-dimensional Form of Schrödinger Equation and Corresponding Perturbations — Anharmonic Oscillator Perturbed by Potential of x^{2n} -Type

Meiun　SHINTANI
The General Education Division of Yamaguchi Prefectural University

Abstract

We treat the Schrödinger equation for the anharmonic oscillator perturbed by the power potential（gx^{2n} , n:positive integer ）and find out three types of its non-dimensional forms through the dimensional analysis. The first one corresponds to the conventional perturbation, and the second yields the JWKB method, and the third is considered to be the same as the first one from the result of our previous work.

Key Words: Schrödinger equation, anharmonic oscillator, x^{2n} -potential, 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

今をさかのぼる10数年前に我々は調和振動子に x^4 タイプ（本稿の定義の $n=2$）の摂動項が加わったシュレーディンガー方程式を対数微分変換によりリッカチ（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。また前稿［2］,［3］では方程式の無次元化の処方により、3つのリッカチ（Riccati）方程式に到達し、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。特に、古典近似としてのＪＷＫＢ法［4］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。また通常のものと異なる新しいタイプの無次元化方程式が導出されうることを示した。本稿では次元解析の一般論からxの 2n 乗項（$n \geq 3$, $n = \mathrm{integer}$）の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、対数微分変換を通しリッカチ（Riccati）方程式に書き改め、この方程式に基づいた摂動論を展開する。また具体例として $n=3$ の摂動を行う。

§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

xの 2n 乗項（$n \geq 3$, $n = \mathrm{integer}$）の入った次の一次元非調和振動子のシュレーディンガー方程式を考える。

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\,\omega_0^2\,x^2 + g\,x^{2n}\right)\psi(x)$$
$$= E\,\psi(x)\,,\ (n = 1,2,3,\ldots.) \qquad (1)$$

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

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

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、

$$\eta = g^{a}\ \omega_0^{b}\ m^{c}\,\hbar^{d}\ E^{e}\,x \qquad (3)$$

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、

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

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

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 2(n-1) & 0 & 0 & -2 & -2 \\ 2 & 1 & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5)$$

をうる。ここで $n=2$ とおけば文献［２］の表示に一致する。この左辺の３×５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、

$$\langle -\frac{d^2}{d\eta^2} + g^{-4a}\,\omega_0{}^{2-4b}\,m^{2-4c}\,\hbar^{-2-4d}\,E^{-4e}\,\eta^2$$

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

となる。$a \neq 0$ ととると、右辺のエネルギー項が η^2項、η^{2n} 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、

$$a = 0 \qquad (7)$$

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に注意しておく。

CaseⅠ：a＝e＝0

この条件のもとに方程式（４）を解いて

$$b = c = {}^{1}\!/_{2}\ ,\ d = -{}^{1}\!/_{2}\ , \qquad (8)$$

$$\eta = \sqrt{\frac{m\,\omega_0}{\hbar}}\ x \qquad (9)$$

をうる。したがって、無次元化された方程式は

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

であたえられる。ここで G、λ は無次元パラメータで

$$G = \frac{2\,g\ \hbar^{(n-1)}}{m^n\omega_0{}^{(n+1)}}\ ,\ \lambda = \frac{2\ E}{\hbar\,\omega_0} \qquad (11)$$

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

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

に至る。この方程式の摂動解は G についての冪展開

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

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

$$b = 1\,,\ c = {}^{1}\!/_{2}\ ,\ e = -{}^{1}\!/_{2} \qquad (14)$$

$$\eta = \omega_0\sqrt{\frac{m}{E}}\ x\,, \qquad (15)$$

をうる。したがって、無次元化された方程式は

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

であたえられる。ここで ϵ ,G は無次元パラメータで

$$\epsilon = \frac{\hbar\,\omega_0}{E}\ ,\ G = \frac{2\,E^{n-1}}{m^n\omega_0{}^{2n}}\ g \qquad (17)$$

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［４］として知られるものに他ならない。具体的には、

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

とおけば、$T(\eta)$ は次のリッカチ方程式

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

を満たす。$T(\eta)$ 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、$T_n(\eta)$ 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。このあたりは稿を改めて詳述することとする。

__CaseⅢ：a = b = 0__

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

$$\left\langle -\frac{d^2}{d\eta^2} + \lambda\eta^2 + 2G\eta^{2n} \right\rangle \widetilde{\psi}(\eta) = 2\widetilde{\psi}(\eta), \tag{23}$$

であたえられる。ここでλ ,Gは無次元パラメータで

$$\lambda = \left(\frac{\hbar\omega_0}{E}\right)^2, \ G = \frac{g\hbar^{2n}}{m^n E^{(n+1)}} \tag{24}$$

と定義した。摂動解を具体的に求めるには、

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

とおけば、$T(\eta)$ は次のリッカチ方程式

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

を満たす。$T(\eta)$ 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、$T_n(\eta), \lambda_n$ を低次から逐次求めればよい。それにより波動関数 $\widetilde{\psi}(\eta)$ 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。

$n=3$の場合について、具体的に基底状態に対し摂動を$O(G^3)$まで行うと

$$\lambda = 4 - \frac{5}{8}G + \frac{1185}{256}G^2 - \frac{142545}{2048}G^3 + O(G^4), \tag{28}$$

$$\begin{aligned} T(\eta) = & -2\eta - G\left(-\frac{1}{2}\eta^5 - \frac{5}{8}\eta^3\right) + G^2\left(\frac{1}{16}\eta^9 + \frac{19}{64}\eta^7 + \frac{79}{64}\eta^5 + \frac{395}{256}\eta^3\right) - G^3\left(\frac{1}{64}\eta^{13} + \right. \\ & \frac{37}{256}\eta^{11} + \frac{409}{512}\eta^9 + \frac{2433}{1024}\eta^7 + \frac{9503}{512}\eta^5 + \\ & \left. \frac{47515}{2048}\eta^3\right) + O(G^4), \end{aligned} \tag{29}$$

となる。$n=2$の場合［３］におこなったように、式（28）および（29）より波動関数およびエネルギー固有値が逐次求まる。この場合にもCase Ⅰの摂動に一致すると推定されるが、この検証は今後に委ねることとしたい。文献[３]でみたように、波動関数についてはCase Ⅲでは、Case Ⅰのgに関する冪級数の形ではなく、自然対数の底eの肩に冪級数でまとまっている。もちろんgを小さいとしてTaylor展開すれば一致することは言うまでもない。が、このCase Ⅲの結論はgの大きさによらないものとみなすこともできる。この点については今後の検討が必要となろう。

§３　おわりに

$n=2$の場合と同様に、我々は本稿でも３つの典型的なケースに辿りついた。Case Ⅰは結合定数gの小さいところでのみ意味があり、Case Ⅱ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。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限に存在するのである。が、しかし物理的に意味のある方程式は少なくなると言える。Case ⅢがCase Ⅰ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。文献[３]では、あくまでもgが小さいとする限りにおいてCase Ⅰと一致することを示したにすぎない。前節の最後に述べたようにgの大きさによらない議論となると果たして同一の物理を与えるかは疑問である。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。今後の研究に委ねたい。

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 the General Education Division 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.2（2011）41-43.
［３］ M. Shintani, Bulletin of the General Education Division of Yamaguchi Prefectural University,（山口県立大学学術情報第５号（共通教育機構紀要第３号））, vol.3（2012）51-54.
［４］ 例えば、シッフ「量子力学」吉岡書店（１９６９年）