量子力学における定常摂動論の再定式化
－非調和振動子を例として－

新　谷　明　雲

A New Reformulation of Conventional Perturbation Methods in Quantum Mechanics

Meiun SHINTANI

Abstract

The conventional perturbation method is reformulated in terms of the transformation, which changes the Schrödinger equation into the Ricatti equation. It greatly helps reducing cumbersome and lĕnghty calculations. As an example of the application, we take the anharmonic oscillator of gx^4-type, and compute to the fourth order of g wave functions and energy eigenvalues for the ground and the first excited one.

1　はじめに

量子力学における時間に依らない展開法として次の二通りの方法が従来から知られている。一つはプランク定数「ħ」の巾に基づく展開法であり、JWKB法（またはWKB法、以下では「ħ展開」と呼ぶ）［1］と呼ばれる半古典的近似法である。波動光学の波長ゼロ極限（アイコナール近似）として幾何光学が再現されるごとく、量子論がプランク定数ゼロ極限で古典論に一致すべしというボーアの対応原理に合致したものといえる。いま一つは結合定数「g」に基づく標準的な展開法［2］である(Rayleigh-Schrödinger method、以下では「g 展開」と呼ぶ)。波動関数を結合定数について巾展開し、さらにgの各項を第ゼロ近似のエネルギー定常状態（規格化完全直交系）に分解する方法である。この二つの方法による結果が常に一致するわけではない。なぜなら、「ħ」がゼロの極限は古典論であるが、「g」がゼロの極限（無摂動状態）は依然量子論だからである。数学的に言えば、前者は群の縮約(group contraction）によるLie環の構造的変化を引き起こすのに対し後者はそのような変化を伴わないのである。共通するのは、いずれの展開も「ħ」や「g」の値が小さいことにより漸近展開（asymptotic expansion）を行っているという点である。量子力学において真に理想的な近似法があるとすれば、この両者のパラメータによる巾級数展開（「2重漸近展開」とでも呼べようか）によるものであろう。しかし、どちらの展開を優先すべきかは悩ましい問題であり、量子力学誕生以来75年あまりを経た今日に至るもこの両者の折合いが果たされたとは言い難い。

本稿では議論を、摂動パラメター「G」が「g」と「ħ」の巾乗の積で与えられる（例えば、għやg^2ħの形）ポテンシャル族に絞ることとする。このとき、ħ展開とg展開が一致し、実質1－パラメータ理論を扱うこととなり、2重漸近展開についての悩みは存在しない。見かけ上はJWKB法に極めて類似するが、その本質は従来のRayleigh-Schrödinger method のように波動関数を摂動展開で直接解くことをせず、変数変換により2階の線形常微分方程式(Strum-Liouville方程式）を1階の非線形微分方程式(Riccati 方程式）としたうえで摂動展開を行うという点にある。即ち我々の方法は「変換論」という道具立てに基づく従来の摂動法の再定式化である。論理が単純明快であり、1階の非斉次微分方程式の特解を求めることで用は済む。特解は視察により未知係数を除いて決まる。未知係数はそれを方程式に代入し、連立方程式を解くことで容易に得られる。摂動の高次については従来の方法に比し、はるかに計算量が少なくて済む。　次節では非調和振動子 (gx^4) を例に我々の「変換論」に基づき具体的に解の構成を行う。

2．x^4モデルの摂動論 ―― 「変換論」による再定式化

2－1　方法の概略

非調和振動子（gx^4）に対し、我々の「変換論」による摂動論の再定式化を行う。

ハミルトニアンが

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{k}{2}x^4+gx^4 \qquad (k=m\omega_0^2) \tag{2.1}$$

で与えられる量子系の定常状態の Schrödinger 方程式は、

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega_0^2x^2+gx^4\right)\psi(x)=E\psi(x) \tag{2.2}$$

である。無次元量

$$\xi=\sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}}\,x,\quad \lambda=\frac{2E}{\hbar\omega_0},\qquad G=\frac{2g\hbar}{m^2\omega_0^3} \tag{2.3}$$

を用いて書き改めると、

$$\left(-\frac{d^2}{d\xi^2}+\xi^2+G\xi^4\right)\psi(\xi)=\lambda\,\psi(\xi) \tag{2.4}$$

となる。(2.2) と (2.4) で同じψを用いたが値は同じであるが関数形は異なることに注意しておく。いま、

$$\psi(\xi)=\exp(S(\xi)) \tag{2.5}$$

とおき、(2.4)を$S(\xi)$の方程式とみなし書き改めれば、

$$-\frac{d^2S}{d\xi^2}-\left(\frac{dS}{d\xi}\right)^2+\xi^2+G\xi^4=\lambda \tag{2.6}$$

この方程式はハミルトン・ヤコビ方程式（H－J方程式）に酷似しているが左辺第1項の2階微分項が余分である。JWKB法では$\hbar$－展開の第0次はH－J方程式で、2階微分は1次で初めて効いてくる。微小パラメーターが、1階微分項と2階微分項のいずれにもかかっていないことから摂動の各次数でこれらの項が常に現れる。方程式(2.5)を

$$\frac{dS}{d\xi}=T(\xi)$$

または、

$$S(\xi)=\int^{\xi}T(\xi)\,d\xi \tag{2.7}$$

の$T(\xi)$を用いて表すと

$$\frac{dT}{d\xi}+T^2-\xi^2-G\xi^4+\lambda=0 \tag{2.8}$$

となる。この方程式はリカッチ（Ricatti）方程式 [3] と呼ばれ、(2.8) の解$T(\xi)$が見つかれば (2.5) から

$$T(\xi)=\frac{1}{\psi(\xi)}\frac{d\psi(\xi)}{d\xi} \tag{2.9}$$

として$\psi(\xi)$が求まるわけである。(2.8)の厳密解がえられないので、摂動的に解くことを考えよう。

通常の摂動論では、

$$\psi(\xi)=\psi_0(\xi)+G\psi_1(\xi)+G^2\psi_2(\xi)+\dots, \tag{2.10a}$$

$$\lambda=\lambda_0+G\lambda_1+G^2\lambda_2+\dots \tag{2.10b}$$

と展開する。ここでは更に$T(\xi)$を次のように展開する。

$$T(\xi)=T_0(\xi)+GT_1(\xi)+G^2T_2(\xi)+\dots, \tag{2.11}$$

更に、(2.8)をGの各次数について書き下すと次の微分方程式群がえられる。

$$O(G^0):\frac{d}{d\xi}T_0(\xi)+T_0^2(\xi)-\xi^2+\lambda_0=0, \tag{2.12a}$$

$$O(G^1):\frac{d}{d\xi}T_1(\xi)+2T_0{}^2T_1(\xi)-\xi^4+\lambda_1=0, \tag{2.12b}$$

$$O(G^2):\frac{d}{d\xi}T_2(\xi)+2T_0(\xi)T_2(\xi)+T_1^2(\xi)+\lambda_2=0, \tag{2.12c}$$

$$O(G^3):\frac{d}{d\xi}T_3(\xi)+2T_0(\xi)T_3(\xi)+2T_1(\xi)T_2(\xi)+\lambda_3=0 \tag{2.12d}$$

一般に、k（≧1）に対し次の式が成り立つ。

$$O(G^{2k}):\frac{d}{d\xi}T_{2k}+2(T_0\cdot T_{2k}+T_1\cdot T_{2k-1}+\cdots+T_{k-1}\cdot T_{k+1})+(T_k)^2+\lambda_{2k}=0, \tag{2.12e}$$

$$O(G^{2k+1}):\frac{d}{d\xi}T_{2k}+2(T_0\cdot T_{2k+1}+T_1\cdot T_{2k}+\cdots+T_k\cdot T_{k+1})+\lambda_{2k+1}=0, \tag{2.12f}$$

これらの方程式を逐次解くことができれば$T(\xi)$の摂動解が得られる。一方、波動関数は(2.9)を摂動展開した以下の式に、(2.12)のT_kを代入することにより逐次求められる。

$$O(G^0):\frac{d}{d\xi}\psi_0(\xi)-T_0(\xi)\psi_0(\xi)=0, \tag{2.13a}$$

$$O(G^1):\frac{d}{d\xi}\psi_1(\xi)-T_0\psi_1-T_1\psi_0=0, \tag{2.13b}$$

$$O(G^2):\frac{d}{d\xi}\psi_2(\xi)-T_0\psi_2-T_1\psi_1-T_2\psi_0=0, \tag{2.13c}$$

$$\vdots$$

$$O(G^k):\frac{d}{d\xi}\psi_k(\xi)-T_0\psi_k-T_1\psi_{k-1}\cdots-T_k\psi_0=0 \tag{2.13d}$$

ここで、波動関数が確率に対応することからψは2乗可積分でなければならない。少なくとも無限遠でその絶対値は0に収束しなければならない。

$$|\psi(\xi)|\to 0 \text{ as } |\xi|\to\infty \tag{2.14}$$

この制約が、リカッチ方程式を解く際にλ_kに確定値をもたらす所以である。

(2.13a)を用いてリカッチ方程式(2.12a)を書き直そう。当然、ψ_0の方程式は第0次の(無摂動)のシュレーディンガー方程式をうる。

$$\left(-\frac{d^2}{d\xi^2}+\xi^2\right)\psi_0(\xi)=\lambda_0\psi_0(\xi) \tag{2.15}$$

この方程式の解は放物型円柱関数（parabolic cylinder functions）[4] としてよく知られている。(2.14)から解は制限され、次のように与えられる。

$$\left.\begin{aligned}&\psi_0^{(n)}(\xi)=H_n(\xi)\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right),\\&\lambda_0=2n+1,\ (n=0,1,2,3,\cdots\cdots)\end{aligned}\right\} \tag{2.16}$$

ここで、$H_n(\xi)$は、n次のエルミート関数（Hermite functions）である。指標「n」は固有状態を指定する量子数である。

以下の2-2節、2-3節ではψ_0として(2.16)のｎ＝0（基底状態）とｎ＝1（第1励起状態）の関数を無摂動関数とした場合についてそれぞれ摂動展開を行う。

2－2　基底状態（ｎ＝0）への適用

基底状態（ｎ＝0）に対し前節に示した手順に従い摂動解を求める。

$$\psi_0(\xi)=\exp(-\frac{\xi^2}{2}),\qquad \lambda_0=1 \tag{2.17}$$

(2.13a)から

$$T_0(\xi)=-\xi \tag{2.18}$$

これを(2.12b)に代入して

$$\frac{d}{d\xi}T_1(\xi)-2\xi\cdot T_1(\xi)-\xi^4+\lambda_1=0 \tag{2.19}$$

を得る。これは、1階の非斉次微分方程式であり公式［3］に基づき解が求められる。

$$T_1(\xi)=[c-(\lambda_1-\frac{3}{4})I(\xi)]\cdot\exp(\xi^2)-\frac{\xi^3}{2}-\frac{3}{4}\xi,$$
$$I(\xi)=\int_{-\infty}^{\xi}dv\ e^{-v^2} \tag{2.20}$$

ここで、ｃを含む項は斉次方程式の一般解を与え、$I(\xi)$は、$0<I(\xi)<\pi^{1/2}$　で有界である。従って、(2.20) の解が有界な波動関数であるためには、$c=0$　且つ　$\lambda_1=3/4$となることが必要十分である。従って、$T_1(\xi)$は次のように与えられる。

$$\left.\begin{aligned}T_1(\xi)&=-\frac{1}{2}\xi^3-\frac{3}{4}\xi,\\ \lambda_1&=\frac{3}{4}\end{aligned}\right. \tag{2.21}$$

次に、T_0, T_1, ψ_0を式(2.13b)に代入して非斉次微分方程式を解くことにより、

$$\psi_1(\xi)=c'\exp(-\frac{1}{2}\xi^2)-(\frac{1}{8}\xi^4+\frac{3}{8}\xi^2)\cdot\exp(-\frac{1}{2}\xi^2)$$

（c' は任意定数）　(2.22)

ψ_1の中のψ_0項は規格化で落ちてしまうので、最初から考えなくてよい。従ってψ_1は次のように与えられる。

$$\psi_1(\xi)=-\left\{\frac{3}{16}H_2(\xi)+\frac{1}{128}H_4(\xi)\right\}\cdot\exp(-\frac{1}{2}\xi^2) \tag{2.23}$$

同様にして、4次までの解と固有値を求めることができる。

$$\left.\begin{aligned}T_2(\xi)&=\frac{1}{16}(2\xi^5+11\xi^3+21\xi),\\ \lambda_2&=-\frac{21}{16}\end{aligned}\right\} \tag{2.24a}$$

$$\left.\begin{aligned}T_3(\xi)&=-\frac{1}{16}(4\xi^7+42\xi^5+180\xi^3+333\xi),\\ \lambda_3&=\frac{333}{64}\end{aligned}\right\} \tag{2.24b}$$

$$\left.\begin{aligned}T_4(\xi)&=\frac{1}{256}(10\xi^9+163\xi^7+1159\xi^5+\frac{8669}{2}\xi^3+\frac{30885}{4}\xi),\\ \lambda_4&=-\frac{30885}{1024}\end{aligned}\right\} \tag{2.24c}$$

基底状態のエネルギー固有値E(ground)は、

$$E(\mathrm{ground})=\frac{1}{2}(1+\frac{3}{4}G-\frac{21}{16}G^2+\frac{333}{64}G^3-\frac{30885}{1024}G^4)\hbar\omega_0+O(G^5) \tag{2.25}$$

これらの結果は、他の方法［5］でえられたものに一致する。また波動関数$\psi=\psi_0+G\psi_1$がシュレーディンガー方程式を1次のオーダーで満たすことは容易に示すことができる。

2－3　第1励起状態（ｎ＝1）への適用

前節と同様に、第1励起状態（ｎ＝1）に摂動を適用する。

$$\left.\begin{aligned}\psi_0(\xi)&=H_1(\xi)\exp(-\frac{1}{2}\xi^2),\\ \lambda_0&=3\end{aligned}\right\} \tag{2.26}$$

ととり、T_kに対する方程式(2.12)へ代入し逐次解くことにより、摂動の4次までの結果を得る。

$$\left.\begin{aligned}T_0(\xi)&=-\xi+\frac{1}{\xi},\quad \lambda_0=3,\\ T_1(\xi)&=-\frac{1}{2}\xi^3+\frac{5}{4}\xi,\quad \lambda_1=\frac{15}{4},\\ T_2(\xi)&=-\frac{1}{8}\xi^5+\frac{17}{16}\xi^3+\frac{55}{16}\xi,\quad \lambda_2=-\frac{165}{16},\\ T_3(\xi)&=-\frac{1}{16}\xi^7+\frac{31}{32}\xi^5-\frac{103}{16}\xi^3-\frac{1305}{64}\xi,\\ &\qquad\lambda_3=-\frac{165}{16},\\ T_4(\xi)&=\frac{5}{128}\xi^9+\frac{333}{256}\xi^7+\frac{2437}{256}\xi^5+\frac{28269}{512}\xi^3\\ &\quad+\frac{173495}{1024}\xi,\quad \lambda_4=-\frac{520485}{1024}\end{aligned}\right\} \tag{2.27}$$

波動関数は、2-2節と同様にして求められる。第1励起状態のエネルギーE(1st)は、(2.27) より以下のように4次のオーダーまで求めることが出来る。

$$E(1\,\mathrm{st})=\frac{1}{2}(3+\frac{15}{4}G-\frac{165}{16}G^2+\frac{3915}{64}G^3-\frac{520485}{1024}G^4)\hbar\omega_0+O(G^5) \tag{2.28}$$

この結果は、他の方法［5］で得られたものに一致する。

3　まとめと展望

前節において、非調和振動子について、「変換論」に基づく摂動論を行った。我々の方法論を要約すると次のようになる。

通常の摂動論ではψに対し直接摂動展開(2.10)を行うが、ここではψからTへの変数変換(2.5)を行い、新しい変数Tに対し摂動論を行う。数学的には、2階のStrum-Liouville型常微分方程式の求積問題から1階の非線形微分方程式－Ricatti 方程式－のそれへの転換である。非線形方程式を解くというのは、あくまでも形式上のことであり、T_0のみが非線形方程式であとのT_kは非斉次の線形微分方程式 (2.12 e)及び(2.12 f)に従う。T_0を知るために、Ricatti 方程式を解く必要はない。なぜなら無摂動関数ψ_0は既知であるため、式(2.15)から求められるからである。ψ_kは非斉次の線形微分方程式 (2.13)から決まる。従って、2階の常微分方程式に対する摂動論は1階の非斉次の線形微分方程式 (2.12e)、(2.12f)、(2.13d)に対する求積問題に帰着する。更に、非斉次微分方程式は、特解と斉次微分方程式の一般解の和からなるが、波動関数の2乗可積分性は特解のみを要求する。従って、求積は多項式で表される非斉次項に注目し、それを斉次部分（T_kに比例する部分）が相殺するように解（多項式の係数）を決めればよいこととなり、極めて初等的な問題に還元される。

この方法の利点として以下のことが言える。

（1） 波動関数とエネルギー固有値が同時に求まるので、エネルギー固有値の計算がどの次数の波動関数で求めたかということに煩わされることがない。

（2） 複雑な摂動公式を用いずとも固有値、固有関数が極めて単純に求まるため、高校生レベルの数学力（微分と初等的な積分）で摂動計算が行え今後の物理教育にも大いに役立つことが予想される。

（3） 固有値に縮退がある場合にも適用可能であること。例えば、原子時計の問題と関連する2重井戸ポテンシャルなどへの適用が考えられる。

今後の展望として、どのようなポテンシャル族に対して適用可能であるのかを理論的に探ってみたい。例えば、x^2項の無いgx^4系へ適用が可能か、可能であればJWKB法の結果［6］との対比を行ってみたい。多自由度系や場の理論への適用可能性も今後の検討材料である。

文　　　献

[1] 例えば、ランダウ・リフシッツ「量子力学１，２」東京図書1969年、第7章.

[2] 上掲書、第6章.

[3] 例えば、「岩波数学辞典　第２版」岩波書店（1968年）、付録　公式14常微分方程式.

[4] M. Ablomowitz and I.A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions (Dover Pub., New York, 1970 , 9th Edition), Chap.19, p.686.

[5] 例えば，A.S. Nikolaev, J.Math.Phys. **37**(1996), 2643, C.H. Bender and T.T.Wu, Phys.Rev. **184**(1969)1231.

[6] A. Voros, Ann.Inst.H.Poincare, **39**(1983)211.