量子力学における定常摂動論の再定式化 II
- 一次元散乱問題への適用 -

新　谷　明　雲

A New Reformulation of Conventional Perturbation Methods in Quantum Mechanics II
－Application to one-dimensional scattering problems－

Meiun SHINTANI

Faculty of Human Life Sciences,
Yamaguchi Prefectural University
Sakurabatake 3-2-1, Yamaguchi, Japan 753-8502

Abstract

In our previous paper we proposed a new reformulation for the stationary perturbation method in quantum mechanics, where the Schrödinger equation is changed into the Ricatti equation through the transformation of logarithmic derivative type. Taking the anharmonic oscillator of gx^4 type, we found that our method remarkably reduces cumbersome and lengthy calculations for wave functions and energy eigenvalues. In the present paper, we apply our method to scattering problems in one space-dimension for cases of energy being much larger than potential barriers. It is shown that it reproduces the well-known results of the Born scattering as well as the conservation of probability at the first order approximation in perturbation expansions.

1　はじめに

我々は前論文［1］(論文「I」として以後引用)において、量子力学の時間に依存しない摂動論、すなわち定常摂動論についての新しい定式化を提案した。その方法の要点は、伝統的な Rayleigh-Schrödinger method［2］のように波動関数$\psi(x)$を摂動級数に展開し直接解くことはせず、つぎの変数変換(「対数微分変換（logarithmic derivative method)」と以後呼ぶこととする。）から出発する。

$$\psi(x) \rightarrow T(x) = \frac{d}{dx} \ell n \psi(x) \qquad (1\text{-}1)$$

この変換により Strum-Liouville 型の２階線形常微分方程式である Schrödinger 方程式は$T(x)$についての１階の非線形微分方程式である Ricatti 方程式となる。この$T(x)$について摂動展開を行う。$\psi(x)$の摂動級数は、(1-1)の摂動展開により$T(x)$のそれとむすばれる。したがって、Schrödinger 方程式の摂動論が Ricatti 方程式の摂動論に転換したことになる。Ricatti 方程式は、非線形方程式であるが摂動の各次数では、第ゼロ次を除けば線形方程式であり、方程式が一階であるため求積が容易である。第ゼロ次は非線形方程式であるが、その解$T_0(x)$は波動関数の第ゼロ次の解$\psi_0(x)$を知っているという前提により、(1-1)の摂動展開の第ゼロ次で与えられる。したがって、Ricatti 方程式の摂動展開から導かれる１階線形の非斉次常微分方程式群を低次から順に高次へと逐次に解き、それらの解を(1-1)に代入することにより波動関数の摂動解が順次求まることとなる。

論文［I］では、一次元調和振動子に摂動としてx^4項を持つ系について、われわれの摂動展開法を適用した。基底状態と第一励起状態についてエネルギー準位および$T(x)$を４次まで求めた。本稿では、この「対数微分変換法」を一次元散乱問題 — 特に、粒子の全エネルギーがポテンシャル障壁に比し圧倒的に大きい（$E >> V(x)$）場合 — に適用し、第一Born近似の結果[3]を再現する。入射エネルギーをあらかじめ固定した上で波動関数を摂動的に求めることが、前論文の摂動論と顕著に異なる点であるが、このような場合にも「対数微分変換法」が有効である事が示される。

2　対数微分変換法の１次元散乱問題（E>>V(x)の場合）への適用

2－1　Ricatti 方程式の摂動論

我々の「対数微分変換」による摂動論をE>>V(x)の場合の１次元散乱問題に適用する。

ここで、cは積分定数で、(2-15) の斉次部分の一般解を表す。

次に、$\psi_1(x)$を求めることに移る。そのために、(A) $x\to\infty$の状態、及び (B) $x\to-\infty$の状態、の2つに分けそれぞれについて$\psi_1(x)$を求めることとする。

(A) $x\to+\infty$の状態

$T_0(x)$, $T_1(x)$および$\psi_1(x)$を (2-10b) 式に代入し、次の非斉次微分方程式をうる。

$$\frac{d}{dx}\psi_1(x)-ik\psi_1(x)-\exp(-ikx)\left(c-\int_{-\infty}^{x}dyU(y)\exp(-iky)\right)=0 \tag{2-17}$$

この方程式を、xについて$-\infty$からxまで積分すると、

$$\psi_1(x)=\exp(ikx)\cdot\left\{c'-\int_{-\infty}^{x}dy\exp(-2iky)\left(c-\int_{-\infty}^{y}dz\exp(2ikz)U(z)\right)\right\} \tag{2-18}$$

ここで c' は積分定数を表わす。$O(G^0)$では$\psi_1(x)=0$である。これがc、c'の値に制限を加える。(2-18) で $U(x)=0$とおけば、

$$c=c'=0 \tag{2-19}$$

とならなければならない。従って、波動関数の一次までの摂動解は

$$\psi(x)=\psi_0(x)+G\psi_1(x)=\exp(ikx)+G\left\{-\frac{i}{2k}\exp(ikx)\cdot\int_{-\infty}^{\infty}dy\,U(y)+\frac{i}{2k}\exp(-ikx)\int_{-\infty}^{\infty}dy\exp(2iky)U(y)\right\} \tag{2-20}$$

で与えられる。第2項の中の最終項は、時間を入れると$t\to+\infty$で消える項であるので、これを落として最終的に$x\to\infty$の解、即ち透過波として (2-21) をうる。

$$\psi(x)=S_{12}\exp(ikx)\quad(x\to\infty) \tag{2-21}$$

ここで、S_{12}は透過波と入射波と結びつける散乱係数 (透過係数) で

$$S_{12}=1-\frac{i}{2k}G\int_{-\infty}^{\infty}dyU(y)+O(G^2) \tag{2-22}$$

で与えられる。

(B) $x\to-\infty$の状態

式(2-17)において、$\psi_1(x)$のxについての積分を、xから$-\infty$の方向に行なうと、

$$\psi_1(x)=\exp(ikx)\cdot\left\{c''-\int_{x}^{-\infty}dy\exp(-2iky)\left(c-\int_{-\infty}^{y}dz\exp(2ikz)\,U(z)\right)\right\} \tag{2-23}$$

ここで、$U(x)=0$に対し$\psi_1(x)=0$であるので、

$$c=c''=0 \tag{2-24}$$

となり、これを考慮して積分を実行すると、

$$\psi_1(x)=\frac{\exp(-ikx)}{2ik}\int_{-\infty}^{\infty}dyU(y)\exp(2iky)-\frac{\exp(ikx)}{2ik}\int_{-\infty}^{\infty}dyU(y) \tag{2-25}$$

$t\to+\infty$での時間を入れた議論から、第2項は、$x\to-\infty$で消えることがわかっている。従って、$\psi_1(x)$は$x\to-\infty$で

$$\psi_1(x)=\frac{\exp(-ikx)}{2ik}\int_{-\infty}^{\infty}dy\,U(y)\exp(2iky)\qquad(x\to\infty) \tag{2-26}$$

となる。従って、$x\to-\infty$で波動関数の一次の摂動解は散乱係数 (反射係数) を用いて、

$$\psi(x)=\psi_0(x)+G\psi_1(x)=\exp(ikx)+S_{11}\exp(-ikx) \tag{2-27}$$

ここで散乱係数は

$$S_{11}=-\frac{iG}{2k}\int_{-\infty}^{\infty}dy\,U(y)\exp(2ikx)+O(G^2) \tag{2-28}$$

で与えられる。

以上の結果は、透過係数、反射係数はボルン散乱の最低次 (第一次ボルン近似) に一致する[3]。

2－3　確率の保存の保存とS行列のユニタリー性

確率の保存は、S行列のユニタリー性に対応する。今の場合、確率の保存は既に求めた散乱係数が、$O(G)$で、次の関係を示す事によりなされる。

$$|S_{11}|^2+|S_{12}|^2=1 \tag{2-28}$$

前節の結果である (2-22)、(2-27) を上式の左辺に代入して、

$$S_{11}S_{11}^*+S_{12}S_{12}^*=1+\frac{m^2G^2}{k^2\hbar^2}\cdot\left\{\left(\int_{-\infty}^{\infty}dx\,V(x)\exp(-2ikx)\right)^2+\left(\int_{-\infty}^{\infty}dx\,V(x)\right)^2\right\}=1+O(G^2) \tag{2-29}$$

このことは、摂動の一次までで確率の保存が成り立つことを示す。ユニタリー性を示すためにはS行列の残りの要素を考えなければならない。x軸の$+\infty$から負の方向に進行する波に対し、透過波と反射波を考えその係数がそれぞれ、S_{21}、S_{22}に対応する。こうして、2行2列のS行列が定義できるので、S行列のユニタリー性は $\mathbf{S^+S=SS^+=1}$ を成分ごとに示せばよいことになる。このことは、量子力学の一般的なテキストに記述があるので割愛するが、ここでは (2-29) 式が$S_{12}=S_{21}$を用いることにより、$\mathbf{S^+S=SS^+=1}$ の(1,1)成分に対応することを指摘しておきたい。

3　まとめと展望

我々の考案した対数微分変換法が、束縛状態の固有値問題のみならず散乱問題にも適用できる事が本稿により示す事が出来た。固有値問題については前論文[Ⅰ]で示したように計算面では、その単純性および手数の少なさにおいて優れていると思われる。一方、散乱問題の場合、通常のボルン散乱の取扱いの方が本稿の方法より簡便であると思われる。しかし重要な点は、計算の簡便さよりむしろ束縛状態における固有値問題および散乱問題が同じ手法で定式

Schrödinger方程式

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right\}\psi(x)=E\,\psi(x) \tag{2-1}$$

において、図1で与えられる配位、即ち、

$$E>>V(x)\quad(-\infty<x<\infty) \tag{2-2a}$$

且つ、

$$V(x)\to 0\quad(|x|\to\infty) \tag{2-2b}$$

の場合を考える。

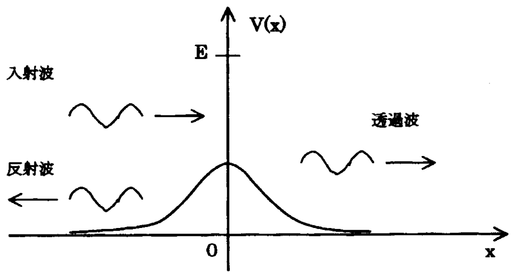

図1　一次元散乱問題（$E>>V(x)$）

このとき、Schrödinger 方程式 (2-1) 式は、簡略化された次の形に書ける。

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2}-k^2\right)\ \psi(x)=-GU(x)\,\psi(x) \tag{2-3}$$

ここで、

$$k^2=\ \frac{2mE}{\hbar^2} \tag{2-4a}$$

$$GU(x)=\frac{2mV(x)}{\hbar^2} \tag{2-4b}$$

であり、Gは摂動展開のパラメータである。また条件（2-2）は、

$$k^2>>GU(x) \tag{2-5}$$

と書くことができる。新しい変数を次の変換（「対数微分変換」）

$$T(x)=\frac{d}{dx}\ell n\,\psi(x) \tag{2-6}$$

によって導入すると、方程式（2-3）は

$$\frac{d}{dx}T(x)+T^2(x)+k^2-GU(x)=0 \tag{2-7}$$

となる。この一階非線形微分方程式は、通常 Ricatti 方程式と呼ばれる。

Ricatti 方程式の摂動展開に移ろう。通常の波動関数の摂動展開

$$\psi(x)=\psi_0(x)+G\psi_1(x)+G^2\psi_2(x)+G^3\psi_3(x)+\dots \tag{2-8}$$

に加え、新しい変数 T(x) を同様にGについて摂動展開

$$T(x)=T_0(x)+GT_1(x)+G^2T_2(x)+G^3T_3(x)+\dots \tag{2-9}$$

を行う。変換式（2-6）で，Gの等冪を比較することにより

$$O(G^0):\frac{d}{dx}\psi_0(x)-\ T_0(x)\psi_0(x)=0 \tag{2-10a}$$

$$O(G^1):\frac{d}{dx}\psi_1(x)-T_0(x)\psi_1(x)-T_1(x)\psi_0(x)=0 \tag{2-10b}$$

$$O(G^2):\frac{d}{dx}\psi_2(x)-T_0(x)\psi_2(x)-T_1(x)\psi_1(x)-T_2(x)\psi_0(x)=0 \tag{2-10c}$$

$$O(G^k):\frac{d}{dx}\psi_k(x)-T_0(x)\psi_k(x)-T_1(x)\psi_{k-1}(x)-\dots-T_k(x)\psi_0(x)=0 \tag{2-10d}$$

を得る。一方、Ricatti 方程式（2-7）式は、摂動の各次数で次のように与えられる。

$$O(G^0):\frac{d}{dx}T_0(x)+T_0{}^2(x)+k^2=0 \tag{2-11a}$$

$$O(G^1):\frac{d}{dx}T_1(x)+2\,T_0(x)\,T_1(x)-U(x)=0 \tag{2-11b}$$

$$O(G^2):\frac{d}{dx}T_2(x)+2\,T_0(x)\,T_2(x)+T_1{}^2(x)=0 \tag{2-11c}$$

$$O(G^3):\frac{d}{dx}T_3(x)+2\,T_0(x)\,T_3(x)+2T_1(x)T_2(x)=0 \tag{2-11d}$$

一般の $k(\geq 1)$ に対し次の式が成り立つ。

$$O(G^{2k}):\frac{d}{dx}T_{2k}(x)+2\,T_0(x)\,T_{2k}(x)+2T_1(x)T_{2k-1}(x)+\dots+2\,T_{k-1}(x)\,T_{k+1}(x)+T_k^2(x)=0 \tag{2-11e}$$

$$O(G^{2k+1}):\frac{d}{dx}T_{2k+1}(x)+2T_0(x)\,T_{2k+1}(x)+2T_1(x)T_{2k}(x)+\dots+2\,T_k(x)\,T_{k+1}(x)=0 \tag{2-11f}$$

（2-11）の方程式を逐次解くことにより $T(x)$の摂動解が得られる。こうして得られた$T_k(x)$を（2-10）に代入することにより波動関数はkの低次から高次へと逐次求められる。

2－2　散乱問題を解く

無摂動（$G=0$）のとき方程式（2-3）は、2種の平面波解

$$\psi_0(x)=\exp(ikx),\ \exp(-ikx) \tag{2-12}$$

をもつ。第1の解はx軸の正の方向に進む波を、第2のものはその逆方向に進む波をそれぞれ表わす。今、x軸の－∞から正の方向に運動量$\hbar k$、エネルギー$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$をもって入射する粒子を考えよう。即ち、$\psi_0(x)$として

$$\psi_0(x)=\exp(ikx) \tag{2-13}$$

ととることとなる。$T_0(x)$は、これを（2-10a）に代入して

$$T_0(x)=ik \tag{2-14}$$

として求まる。この解は、当然ながら（2-11a）を満たす。これを（2-11b）に代入すれば、

$$\frac{d}{dx}T_1(x)+2ikT_1(x)-U(x)=0 \tag{2-15}$$

となり、これを $T_1(x)$ について解けば

$$T_1(x)=\exp(-2ikx)\left(c-\int_{-\infty}^{x}dx'U(x')\exp(2ikx')\right) \tag{2-16}$$

化出来ることにある。

また、本稿では、空間のいたるところで$E>>V(x)$が成り立つ場合に限定したが、それ以外の場合、例えばトンネル効果をこの方法で定式化可能か否かを検討してみる事は興味深い課題の一つである。

最後に、われわれの方法が、物理学の問題を離れ２階の線形（偏）微分方程式の摂動解に導く一般的方法を提供するものと考えられるため、この方法のより広範な適用可能性を探る事も今後の重要な課題となろう。多くの方々が、この方法の有用性を認識しその適用範囲を広めて頂ければこの上ない幸せである。

この論文を作成する上で、本学の畔津忠博先生にはお忙しい中を熱心に耳を傾け、議論に参加して頂いたことに深く感謝します。

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、ランダウ・リフシッツ「量子力学Ⅰ、Ⅱ」東京図書（1969年）第７章

[3] 例えばRubin H. Landau, Quantum Mechanics II (Wiley, New York 1996), Chap.1- 7, E. Merzbacher, Quantum Mechanics, 2nd edition (Wiley, New York 1970), Chap.6.