

Divergence-free WKB 法 (3 次の代数方程式に基づく WKB 法)

俵口忠功¹ (広島大学大学院先端物質科学研究科)

目 次

1 はじめに	747
2 シュレディンガー方程式の解の性質	748
2.1 シュレディンガー方程式	748
2.2 一般解	749
2.3 減衰解と爆発解	750
2.4 束縛状態に対する厳密な量子化条件	751
3 WKB 法 (2 次の代数方程式に基づく WKB 法)	752
3.1 シュレディンガー方程式の 2 つの解	752
3.2 WKB 1 次近似	753
3.3 WKB 1 次近似での減衰解、爆発解	754
3.4 WKB 1 次近似での量子化条件 (Bohr-Sommerfeld 量子化条件)	755
4 Divergence-free WKB 法 (3 次の代数方程式に基づく WKB 法)	755
4.1 量子補正の繰り込み	755
4.1.1 非線型シュレディンガー方程式の 3 つの解	756
4.1.2 新しい WKB 法 (3 次の代数方程式に基づく WKB 法)	757
4.2 Divergence-free WKB 近似	758
4.3 Divergence-free WKB 近似での減衰解	761
4.4 Divergence-free WKB 近似での量子化条件	763
4.5 非線型シュレディンガー方程式の基底状態	763
5 結果と考察	764
5.1 Divergence-free WKB 近似波動関数の特徴	764
5.2 線形ポテンシャル	764
5.3 調和振動子ポテンシャル	765
5.4 モース・ポテンシャル	766
6 総括と展望	767
A 非線形シュレディンガー方程式の厳密解	768
A.1 非線形シュレディンガー方程式の実数解	769
A.2 非線形シュレディンガー方程式の複素共役な解	769
B 線形ポテンシャルの場合の Divergence-free WKB 近似での波動関数	771
B.1 補正許容領域での波動関数	771
B.2 補正禁止領域での波動関数	772
B.3 古典許容領域での漸近形	773
B.4 古典禁止領域での漸近形	774

¹現 立命館大学大学院理工学研究科 E-mail: hyoo@ike-dyn.ritsumei.ac.jp

1 はじめに

WKB 法は、作用が定数 $\hbar$ に比べて十分大きい極限での量子力学的諸量の数学的記述を与え、それゆえに、量子力学と古典力学の関係を示すものである。WKB 法は量子力学の誕生直後に提案され、その後、現在に至るまで物理及び化学での多くの分野に亘って幅広く適用されてきた [1, 2, 3, 4]。量子力学的粒子の波動関数は、位置と運動量の不確定性のために、古典力学では粒子が存在しえない領域 (古典禁止領域) においても、ゼロでない値を持ち得る。WKB 法でもこのことは説明できる。ところが WKB 法では、古典的転回点で、波動関数が発散してしまう。この発散は、WKB 法が特異摂動法に基づく事に起因している。特異摂動法によると、ゼロ次解は発散しないが、1 次以降の解はすべて特異点で発散し、しかも高次ほど発散が強くなる。WKB 法ではゼロ次解を古典的軌道にとるために、古典的転回点が特異点になってしまう。そのため、波動関数は $\hbar$ のオーダー (prefactor) 以降が古典的転回点で発散し、古典的転回点近傍では、量子補正に失敗するのである。

特異摂動法の枠内で、古典的転回点近傍での量子補正の効果を正しくとりいれていくには、ゼロ次解に量子補正を繰り込めばよい。本論文では、この繰り込みを WKB 法の自然な拡張として実行する方法を提案する。この方法により、量子補正された転回点、量子補正されたエネルギー量子化条件が導出できる。この方法のもう 1 つの特長は、この方法が特異摂動法的一种でありながら、最終的に得られる波動関数は “uniformly valid” [5, 6] になることである。ここで “uniformly valid” とは、ある関数を $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n(x)$ と展開したときに、すべての N, x に対して $f_N(x)$ は $f_{N-1}(x)$ に対する小さな補正であることを意味する。さらに、線型シュレディンガー方程式 (linear Schrödinger equation : LSE) の解だけではなく、非線型シュレディンガー方程式 (nonlinear Schrödinger equation : NLSE) の解についても同じ理論の枠内で論じることができる。NLSE の基底状態に対する従来の近似としては、Thomas-Fermi (TF) 近似 [7, 8] が最も有名である。この TF 近似での波動関数も古典的転回点近傍で破綻する。これは、TF 近似もまた特異摂動法的一种だからである。この問題も同時に解決できた。すなわち、NLSE に対する uniformly valid な解を構成できた。

この論文の構成は以下の通りである。第 2 章では、シュレディンガー方程式 (LSE) の解の一般的な性質について議論する。これにより、WKB 法 (第 3 章) とわれわれの方法 (第 4 章以降) の違いがより明確になる。§2.1 では、本論文で一貫して使用される表記法の説明を行う。次いで、LSE の一般解 [4, 9] を構成し (§2.2)、減衰解と爆発解について説明し、その形式的な表式を提示する (§2.3)。§2.4 では、束縛状態に対するエネルギー量子化条件の形式的な表式 [9] を提示する。ところが、これらの表式は厳密であるが形式的なものに過ぎず、具体例に直ちに適用できるわけではない。そこで、以下の章ではこれらの表式に対する半古典的な近似を行う。

第 3 章では、従来の WKB 法 (2 次の代数方程式に基づく WKB 法) のレビューを行う。WKB 法では、ゼロ次近似で波動関数の波数を古典的運動量で近似する。ところが、WKB 法は特異摂動法であるために、高次の摂動を施しても厳密な波数に漸近しない。§3.1 では、WKB 法での級数展開の方法を説明する。また、この摂動が特異摂動になっていることを確認する。§3.2 では、この級数展開のうちの最初の 2 項のみを残す近似について考える。本論文では、この近似を “WKB 1 次近似” と呼ぶことにする。次いで、WKB 1 次近似での減衰解、爆発解 (§3.3)、及びエネルギー量子化条件 (Bohr-Sommerfeld 量子化

条件)(§3.4)を導出する。

第4章では、われわれが研究を行ってきた新しいWKB法(3次の代数方程式に基づくWKB法)について説明する。WKB法の自然な拡張により、量子補正を正しく行う。§4.1は本論文中でもとりわけ重要な部分であり、どのようにして量子補正を繰り込むかが述べられる。また、何故NLSEの解を同じ理論の枠内で取り扱えるのかを説明する。サブセクションではNLSEを2通りの方法で解析する。§§4.1.1では、NLSEをWKB法と同様の方法(§3.1)で解き、LSEの解と比較する。§§4.1.2では、NLSEを解くための新しい級数展開の方法を提示する。§4.2では、§§4.1.2で提案された級数展開のうちのゼロ次項のみを取り出す近似を考える。この級数展開により構成された波動関数が発散する点をもたないことから、我々はこの近似を“Divergence-free WKB近似”と呼ぶことにする。次いで、Divergence-free WKB近似での減衰解(§4.3)、エネルギー量子化条件(§4.4)、及びNLSEの基底状態(§4.5)を導出する。

以上で、§2.2及び§3.2, §4.2はそれぞれ、LSEの一般解の厳密形とそれに対する近似である。§2.3及び§3.3, §4.3はそれぞれ、LSEの減衰解の厳密形とそれに対する近似である。また、§2.4及び§3.4, §4.4はそれぞれ、エネルギー量子化条件の厳密形とそれに対する近似である。それぞれを比較されると、第3, 4章での近似の違いが明確になると思う。第5章では、第4章で得られた結果を線形ポテンシャル(§5.1), 調和振動子ポテンシャル(§5.2), 及びモース・ポテンシャル(§5.3)に適用し、その結果を議論する。最終章では、現在までの仕事を総括し、かつ将来の仕事を概観する。Appendix. A, Bはそれぞれ、本文中の§§4.1.1, §4.3の計算の詳細を記したものであるが、加えて、これらのAppendixが将来の新しい発展につながる可能性もあると考えている。

2 シュレディンガー方程式の解の性質

第2章では、シュレディンガー方程式の解の一般的な性質について議論する。これにより、WKB法(第3章)とわれわれの方法(第4章以降)の違いがより明確になる。

2.1 シュレディンガー方程式

本節では、本論文を通して、一貫して使用される表記法を説明しておく。定常状態に対する1次元シュレディンガー方程式は次式で与えられる。

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + Q^2(x)\Psi = 0 \quad (1)$$

ここで、 $Q^2 \equiv E - V$ で $E, V(x)$ はそれぞれ全エネルギー、ポテンシャルエネルギーでともに実数とする。また x は位置座標を表し、実数とする。波動関数 $\Psi(x)$ は、本論文では次のようにおいて話を進める。

$$\Psi = e^{\psi/\hbar} \quad (2)$$

ここで、波動関数 Ψ が複素数なので ψ もまた複素数である。ここで、ポテンシャルの特徴的な長さのスケール l を用いて、距離、エネルギーをそれぞれ次のようにスケールする。但し、スケール後の無次

元量は tilde ($\sim$) をつけて区別する。

$$\tilde{x} \equiv \frac{x}{l}, \quad \tilde{Q}^2 \equiv \frac{Q^2}{\hbar^2/2ml^2} \quad \left(\tilde{E} - \tilde{V} \equiv \frac{E - V}{\hbar^2/2ml^2} \right)$$

これらの無次元量を用いて、(1) 式を書き直すと $d^2\Psi/d\tilde{x}^2 + \tilde{Q}^2(\tilde{x})\Psi = 0$ となる。また、 ψ を $\hbar$ でスケールし $\tilde{\psi} \equiv \psi/\hbar$ とする。以下では、混同の恐れが無い限り、記号 tilde ($\sim$) を省略することにする。故に、以下ではシュレディンガー方程式、波動関数を次のように記す。

$$\Psi''(x) + Q^2(x)\Psi = 0, \quad \Psi = e^\psi \quad (3)$$

ここで、prime ($'$) は x についての微分である。また、諸量の $\hbar$ のオーダー $x \propto \hbar^0$, $Q \propto \hbar^{-1}$, $\psi \propto \hbar^{-1}$ を確認しておくことは重要なことである。本章の以下の部分では ψ を次のようにおいて話を進める。

$$\psi = \log \Phi + iS \quad (4)$$

ここで Φ, S はともに実数とする。 S は作用と呼ばれる量であり、 $\Phi = |\Psi|$ は波動関数の包絡線である。

2.2 一般解

シュレディンガー方程式 (3) に ψ (4) を代入し実部と虚部に分解する。

$$\begin{cases} \Phi'' + (Q^2 - K^2)\Phi = 0 \\ \Phi = K^{-1/2} \end{cases} \quad (5)$$

ここで、 $K \equiv S'$ は波動関数の波数を表す。(5) 式の第 2 式を (5) 式の第 1 式に代入して Φ を消去することで、 K の満たす方程式を次のように得ることができる [4]。

$$K^2 - Q^2 = \frac{3}{4} \left(\frac{K'}{K} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{K''}{K} = K^{1/2} \frac{d^2}{dx^2} K^{-1/2} \quad (6)$$

ここで、(6) 式の左辺 ($K^2 - Q^2$) 及び右辺の $\hbar$ の次数はそれぞれ $\mathcal{O}(\hbar^{-2})$ 及び $\mathcal{O}(\hbar^0)$ であることに注意する。逆に、 K を消去すると、次のような Φ に関する一種の非線形方程式になることを付記しておく。

$$\Phi'' + Q^2(x)\Phi = \Phi^{-3} \quad (7)$$

(6) 式の解を用いてシュレディンガー方程式 (3) の形式解 $\Psi = \Phi e^{iS}$ は次のようになる。

$$\Psi(x) = K^{-1/2} \exp \left(i \int^x dx' K(x') \right)$$

ある $K(x)$ が、(6) 式を満たすとき、 $-K(x)$ もまた (6) 式を満たすので

$$\Psi^*(x) = K^{-1/2} \exp \left(-i \int^x dx' K(x') \right)$$

もまたシュレディンガー方程式 (3) の形式解である。上の 2 つの解は一次独立なので、シュレディンガー方程式 (3) の一般解は次のようになる [4, 9]。

$$\Psi(x) = A_+ K^{-1/2} \exp \left(i \int^x dx' K(x') \right) + A_- K^{-1/2} \exp \left(-i \int^x dx' K(x') \right) \quad (8)$$

ここで $A_{\pm}$ は複素数の定数である。

2.3 減衰解と爆発解

(8) 式は次のように書き換えられる。

$$\Psi(x) = B_1 K^{-1/2} \sin \left(\int_{x_0}^x dx' K(x') \right) + i B_2 K^{-1/2} \cos \left(\int_{x_0}^x dx' K(x') \right) \quad (9)$$

ここで、 B_1, B_2 は実数の定数で、 x_0 は任意の点である。(9) 式は 2 つの独立な実数解

$$\begin{cases} \Psi^{(1)} \equiv K^{-1/2} \sin \left(\int_{x_0}^x dx' K(x') \right) \\ \Psi^{(2)} \equiv K^{-1/2} \cos \left(\int_{x_0}^x dx' K(x') \right) \end{cases} \quad (10)$$

もまた、シュレディンガー方程式 (3) の解であることを意味している。

今、 $V'(x) > 0$, $\lim_{x \rightarrow \infty} V(x) > E$ を満たすポテンシャルを考える。このとき $x \rightarrow \infty$ で、波動関数は振動しなくなる。つまり波動関数は実数になる。これは波数 $K(x)$ が $x \rightarrow \infty$ で、ゼロに漸近することを意味する。従って、波動関数 $\Psi^{(1)}$ の $x \rightarrow \infty$ での漸近形は次のようになる。

$$\Psi^{(1)} \sim K^{-1/2} \sin \left(\int_{x_0}^{\infty} dx' K(x') \right)$$

この式は、 $\Psi^{(1)}$ が遠方で、 $K^{-1/2}$ に比例し、その比例定数が $\sin \left(\int_{x_0}^{\infty} dx' K(x') \right)$ であることを示している。ここで、 x_0 が $\int_{x_0}^{\infty} dx' K(x') \neq n\pi$ (n 整数) なる関係を満たすとき $\Psi^{(1)} \propto K^{-1/2}$ に従って遠方で発散する。逆に、 $\int_{x_0}^{\infty} dx' K(x') = n\pi$ (n 整数) なる関係が成立するとき、 $\Psi^{(1)}$ は遠方でゼロに漸近する。特に、 $x_0 = \infty$ のときの 2 つの独立解

$$\begin{cases} \Psi^{(1)}(x) = K^{-1/2} \sin \left(\int_x^{\infty} dx' K(x') \right) \\ \Psi^{(2)}(x) = K^{-1/2} \cos \left(\int_x^{\infty} dx' K(x') \right) \end{cases} \quad (11)$$

のうち、 $\Psi^{(1)}$ を減衰解、 $\Psi^{(2)}$ を爆発解と呼ぶことにする。前者は遠方でゼロに漸近し、後者は遠方で $K^{-1/2}$ に従って発散するからである。

本節の最後に $\lim_{x \rightarrow \infty} V(x) > E$ を満たすポテンシャルの例として、線形ポテンシャルをとり上げて減衰解、爆発解について説明しておく。因みに、本論文ではたびたび、線形ポテンシャルをとり上げるが、特に断わり書きが無い限り、次の表記を用いるものとする。

$$Q^2 = E - V = -F(x - x^{(c)}) = -F^{2/3}\xi$$

ここで $F \equiv V'(x^{(c)}) > 0$, $\xi \equiv F^{1/3}(x - x^{(c)})$ である。 x の代わりに、 ξ を用いてシュレディンガー方程式 (3) を書き改める。

$$\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} - \xi\Psi = 0 \quad (12)$$

(12) 式の 2 つの独立解は、減衰解 $\text{Ai}(\xi)$ 及び爆発解 $\text{Bi}(\xi)$ で表現できる [10]。実際、これらの $|\xi| \gg 1$ での漸近形はそれぞれ次のようになる。

$$\text{Ai}(\xi) \sim \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi}}(-\xi)^{-1/4} \sin \left(\frac{2}{3}(-\xi)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right) & (\xi < 0) \\ \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\xi^{-1/4} \exp \left(-\frac{2}{3}\xi^{3/2} \right) & (\xi > 0) \end{cases} \quad (13)$$

$$\text{Bi}(\xi) \sim \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi}}(-\xi)^{-1/4} \cos\left(\frac{2}{3}(-\xi)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) & (\xi < 0) \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}}\xi^{-1/4} \exp\left(\frac{2}{3}\xi^{3/2}\right) & (\xi > 0) \end{cases} \quad (14)$$

古典禁止領域 ($\xi > 0$) での両者の振る舞い、及び古典許容領域 ($\xi < 0$) での両者の位相差が丁度 $\pi/2$ であることに着目されたい。ここで、線形ポテンシャルの場合の減衰解 $\Psi^{(1)}$ と爆発解 $\Psi^{(2)}$ を図 1 に表示する。両者は、包絡線 Φ の中で振動する波に他ならず、その違いは、位相差 $\pi/2$ だけである。このときの波数 $K(\xi)$ を図 2 に表示する。但し、簡単のため、 $F = 1$ とした。因みに、同図中、 $Q(\xi) = \sqrt{-\xi}$ は古典的運動量、 K_n ($n = 3, 4$) は本論文の第 4 章以降で述べられる n 次の代数方程式に基づく WKB 近似された波数である。この図は、WKB 法 (第 3 章) とわれわれの方法 (第 4 章以降) の相違を明確に表現している。WKB 近似では、波数 K を古典的運動量 Q で近似するのに対して、われわれの方法では、波数 K を K_n で近似するのである。第 4 章では、 K_3 について説明される。但し、そこでは $K_3 = k$ なる表示が用いられている。 K_4 については、第 6 章で紹介される。

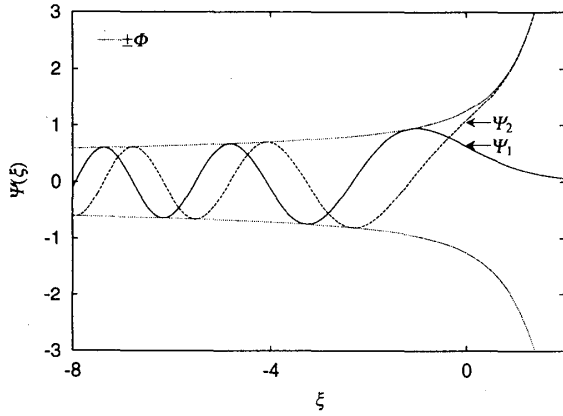


図 1: 線形ポテンシャルの場合の減衰解 $\Psi^{(1)}$ と爆発解 $\Psi^{(2)}$ 。両者は無限遠で対称的な振る舞いをするが、位相が $\pi/2$ ずれているだけの違いしかないのである。

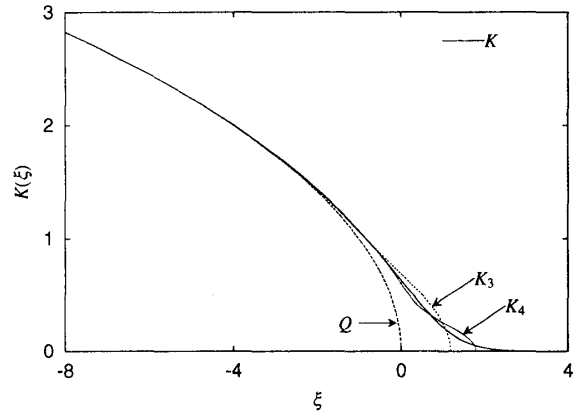


図 2: 線形ポテンシャルの場合の波数とその近似 ($F = 1$)。波数 K の古典的運動量 Q からのずれが量子効果を表している。 K_3, K_4 は第 4 章以降で行われる近似である。

2.4 束縛状態に対する厳密な量子化条件

ポテンシャルが $\lim_{|x| \rightarrow \infty} V(x) > E$ を満たすとき、波動関数は $|x| \rightarrow \infty$ で減衰しなければならない。この状態を束縛状態と言う。§2.3 における議論から、 $x \rightarrow \infty$ で減衰するためには波動関数は次式で記述されなければならない。

$$\Psi(x) = N_1 K^{-1/2} \sin\left(\int_{\infty}^x dx' K(x')\right) \quad (15)$$

N_1 は規格化因子。一方、 $x \rightarrow -\infty$ で減衰するためには波動関数は次式で記述されなければならない。

$$\Psi(x) = N_2 K^{-1/2} \sin\left(\int_{-\infty}^x dx' K(x')\right) \quad (16)$$

N_2 は規格化因子。さらに、波動関数の一価性のために、波数 $K(x)$ は次なる量子化条件を満たさなければならないことが分かる [9]。

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx K(x) = S(\infty) - S(-\infty) = (n+1)\pi \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (17)$$

量子化条件 (17) はエネルギー固有値を陰的に決定する。結局、(17) 式は、束縛状態の波動関数が節の $(n+1)$ 個ある定在波であることを意味している。図 3 を見ると、そのことがよく理解できる。

ところが、この表式 (17) は厳密であるが形式的なものに過ぎず、具体例に直ちに適用できるわけではない。そこで、以下の章ではこれらの表式に対する半古典的な近似を行う。後に見るように、WKB 法 (第 3 章) では、 K を Q で近似し、われわれの方法 (第 4 章以降) では、 K を K_n で近似した量子化条件が導出される。

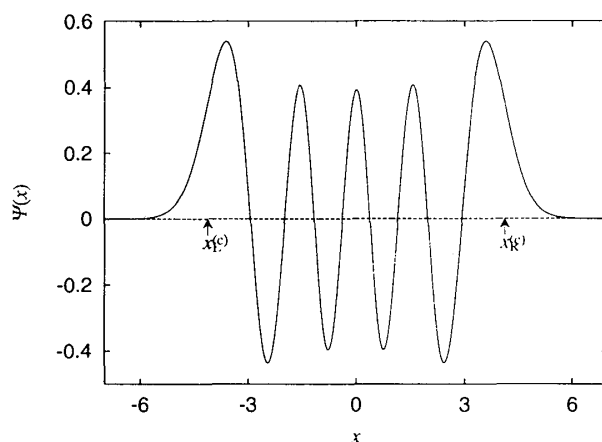


図 3: 調和振動子ポテンシャル ($V = x^2$, $n = 8$) の場合の波動関数。節の 9 個ある定在波になっている。 $x_L^{(c)}$, $x_R^{(c)}$ はそれぞれ左側、右側の古典的転回点。

3 WKB 法 (2 次の代数方程式に基づく WKB 法)

本章では、WKB 法のレビューを行う [1, 2]。WKB 法では、ゼロ次近似で波動関数の波数を古典的運動量で近似する。ところが、WKB 法は特異摂動法であるために、高次の摂動を施しても厳密な波数に漸近しない。

3.1 シュレディンガー方程式の 2 つの解

シュレディンガー方程式 $\Psi'' + Q^2\Psi = 0$ (3) は $\Psi = e^\psi$ により次のように書き換えられる。

$$\psi'' + (\psi')^2 + Q^2 = 0 \quad (18)$$

WKB 法では、ゼロ次で ψ'' を無視して摂動展開を行う。これにより、 ψ' のゼロ次は 2 次の代数方程式を満たす。

$$(\psi'_0)^2 + Q^2 = 0 \quad (19)$$

これが本論文で、WKB 法を「2 次の代数方程式に基づく WKB 法」と呼ぶ由縁である。級数展開は次のようにして計算される。

$$\lambda \psi'' + (\psi')^2 + Q^2 = 0 \quad (20)$$

$$\psi' = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \psi'_n \quad (21)$$

ここで、 λ は展開パラメータであり、(20) 式の級数を求めた後で $\lambda = 1$ とおく。(21) 式を (20) 式に代入して λ のべきで整理して解くと次のようになる。

$$\psi'_0 = \pm iQ \quad (22)$$

$$\psi'_1 = -\frac{\psi''_0}{2\psi'_0} = -\frac{Q'}{2Q} \quad (23)$$

$$\psi'_n = -\frac{1}{2\psi'_0} \left(\psi''_{n-1} + \sum_{m=1}^{n-1} \psi'_{n-m} \psi'_m \right) \quad (n = 2, 3, \dots) \quad (24)$$

ψ'_2, ψ'_3 を求めておく。

$$\psi'_2 = \frac{\psi'_0}{2} Q^{-3/2} \frac{d^2}{dx^2} Q^{-1/2} = \frac{\psi'_0}{2} \frac{1}{Q^2} \left[\frac{3}{4} \left(\frac{Q'}{Q} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{Q''}{Q} \right] \quad (25)$$

$$\psi'_3 = -\frac{1}{4} \frac{d}{dx} \left(Q^{-3/2} \frac{d^2}{dx^2} Q^{-1/2} \right) = \frac{1}{4Q^2} \left[3 \left(\frac{Q'}{Q} \right)^3 - 3 \frac{Q'Q''}{Q^2} + \frac{1}{2} \frac{Q'''}{Q} \right] \quad (26)$$

但し、古典禁止領域 ($Q^2 < 0$) では、これらの式で $Q = -i|Q|$ とおけばよい。ここで、すべての $n = 0, 1, 2, \dots$ に対して $\psi'_n \propto \hbar^{n-1}$ である。つまり、(21) の展開は $\hbar$ のべき展開と同じことである。因みに、上の級数において、すべての $n = 0, 1, 2, \dots$ に対して ψ'_{2n} は純虚数で、 ψ'_{2n+1} は実数であることが証明できる。ここで、重要なことを指摘しておく。 ψ'_n の中で、ゼロ次解 ψ'_0 以外はすべて、古典的転回点 $Q(x^{(c)}) = 0$ で発散している。しかも、高次ほど、発散がますます強くなっている。これが、特異摂動法の特徴である。WKB 法では、ゼロ次で古典極限を考えるために、古典的転回点が特異点となってしまう。それゆえに、特異摂動法の宿命に従って古典的転回点近傍では量子補正に失敗するのである。

3.2 WKB 1 次近似

前節で求めた級数展開のうち、最初の 2 項のみを取り出して、より高次の項からの寄与は無視するという近似を考える。この近似 $\psi' \simeq \psi'_0 + \psi'_1$ を本論文では「WKB 1 次近似」ということにする。本章の以下の部分ではこの WKB 1 次近似のみを議論する。WKB 1 次近似が十分成立する条件は $|\psi'_0| \gg |\psi'_2|$ である。これは次のように記述される。

$$\left| Q^{-3/2} \frac{d^2}{dx^2} Q^{-1/2} \right| \ll 1 \quad (27)$$

この条件は、明らかに古典的転回点 $x^{(c)}$ では破綻する。特異摂動が破綻する領域は boundary layer [5, 6] と呼ばれる。WKB 1 次近似でのシュレディンガー方程式の一般解は次のようになる。

$$\Psi_{\text{WKB}} = A_+ Q^{-1/2} \exp\left(i \int_{x^{(c)}}^x dx' Q(x')\right) + A_- Q^{-1/2} \exp\left(-i \int_{x^{(c)}}^x dx' Q(x')\right) \quad (28)$$

ここで $A_{\pm}$ は複素数で定数。古典禁止領域 ($Q^2 < 0$) では $Q = -i|Q|$ とおけばよい。ところで、(28) 式は、形式解 (8) において、波数 $K(x)$ を古典的運動量 $Q(x)$ で近似した形になっている。つまり、(6) 式の右辺を落とす近似であるといえる。

3.3 WKB 1 次近似での減衰解、爆発解

本節では、 $\lim_{x \rightarrow -\infty} V(x) < E$ かつ $\lim_{x \rightarrow \infty} V(x) > E$ を満たすポテンシャルを考える。また、簡単のため、常に $V'(x) > 0$ とする。古典禁止領域 ($Q^2 < 0$, $x > x^{(c)}$) では、減衰解、爆発解は次のように記述される。

$$\begin{aligned} \Psi_{\text{WKB}}^{(1)}(x) &= |Q|^{-1/2} \exp\left(-\int_{x^{(c)}}^x dx' |Q(x')|\right) \\ \Psi_{\text{WKB}}^{(2)}(x) &= |Q|^{-1/2} \exp\left(\int_{x^{(c)}}^x dx' |Q(x')|\right) \end{aligned}$$

故に、減衰解及び爆発解の WKB 1 次近似を求めるときに解くべき問題は「係数 $A_{\pm}^{(1)}$, $A_{\pm}^{(2)}$ を以下の (29) 及び (30) 式の漸近形が、厳密な表式 (11) の漸近形と一致するように決定すること」である。

$$\Psi_{\text{WKB}}^{(1)}(x) = \begin{cases} A_+^{(1)} Q^{-1/2} \exp\left(i \int_{x^{(c)}}^x dx' Q\right) + A_-^{(1)} Q^{-1/2} \exp\left(-i \int_{x^{(c)}}^x dx' Q\right) & (x < x^{(c)}) \\ |Q|^{-1/2} \exp\left(-\int_{x^{(c)}}^x dx' |Q|\right) & (x > x^{(c)}) \end{cases} \quad (29)$$

$$\Psi_{\text{WKB}}^{(2)}(x) = \begin{cases} A_+^{(2)} Q^{-1/2} \exp\left(i \int_{x^{(c)}}^x dx' Q\right) + A_-^{(2)} Q^{-1/2} \exp\left(-i \int_{x^{(c)}}^x dx' Q\right) & (x < x^{(c)}) \\ |Q|^{-1/2} \exp\left(\int_{x^{(c)}}^x dx' |Q|\right) & (x > x^{(c)}) \end{cases} \quad (30)$$

これを接続問題といい、得られる結果を接続公式という [1]。一般のポテンシャルに対して、係数 $A_{\pm}^{(1)}$, $A_{\pm}^{(2)}$ を厳密に決定することは容易ではない。しかし、厳密解が知られている場合には、 $A_{\pm}^{(1)}$, $A_{\pm}^{(2)}$ を厳密に決定できる。まず、線形ポテンシャルの場合に、 $A_{\pm}^{(1)}$, $A_{\pm}^{(2)}$ がどうなるかを調べる。線形ポテンシャル $Q^2 = F^{2/3}(-\xi)$ の場合、 $Q(x)$ 及びその積分はそれぞれ次のようになる。

$$\begin{cases} Q = F^{1/3}(-\xi)^{1/2} & , & \int_{x^{(c)}}^x dx' Q(x') = \frac{2}{3}(-\xi)^{3/2} & (Q^2 < 0, \xi < 0) \\ |Q| = F^{1/3}\xi^{1/2} & , & \int_{x^{(c)}}^x dx' |Q(x')| = \frac{2}{3}\xi^{3/2} & (Q^2 > 0, \xi > 0) \end{cases}$$

故に (29), (30) 式はそれぞれ次のようになる。

$$F^{1/6} \Psi_{\text{WKB}}^{(1)} \sim \begin{cases} A_+^{(1)}(-\xi)^{-1/4} \exp\left(-i\frac{2}{3}(-\xi)^{3/2}\right) + A_-^{(1)}(-\xi)^{-1/4} \exp\left(i\frac{2}{3}(-\xi)^{3/2}\right) & (\xi < 0) \\ \xi^{-1/4} \exp\left(-\frac{2}{3}\xi^{3/2}\right) & (\xi > 0) \end{cases} \quad (31)$$

$$F^{1/6} \Psi_{\text{WKB}}^{(2)} \sim \begin{cases} A_+^{(2)}(-\xi)^{-1/4} \exp\left(-i\frac{2}{3}(-\xi)^{3/2}\right) + A_-^{(2)}(-\xi)^{-1/4} \exp\left(\frac{2}{3}(-\xi)^{3/2}\right) & (\xi < 0) \\ \xi^{-1/4} \exp\left(\frac{2}{3}\xi^{3/2}\right) & (\xi > 0) \end{cases} \quad (32)$$

これらが、それぞれ Airy 関数 $\text{Ai}(\xi)$, $\text{Bi}(\xi)$ の漸近形 (13), (14) と全体の定数倍を除いて一致するためには $A_+^{(1)} = ie^{-i\pi/4}$, $A_-^{(1)} = -ie^{i\pi/4}$, $A_+^{(2)} = e^{-i\pi/4}/2$, $A_-^{(2)} = e^{i\pi/4}/2$ でなければならない。この結果を一般のポテンシャルに対しても適用することにする。これが許されるのは、boundary layer では、ポテンシャルを線形 $V(x) \sim V'(x^{(c)})(x - x^{(c)})$ で近似するのがよい近似になっているからである [11]。従って、減衰解及び爆発解 (11) 式の WKB 1 次近似はそれぞれ次のようになる。

$$\Psi_{\text{WKB}}^{(1)}(x) = \begin{cases} Q^{-1/2} \sin\left(\int_x^{x^{(c)}} dx' Q(x') + \frac{\pi}{4}\right) & (x < x^{(c)}) \\ \frac{1}{2}|Q|^{-1/2} \exp\left(-\int_{x^{(c)}}^x dx' |Q(x')|\right) & (x > x^{(c)}) \end{cases} \quad (33)$$

$$\Psi_{\text{WKB}}^{(2)}(x) = \begin{cases} Q^{-1/2} \cos\left(\int_x^{x^{(c)}} dx' Q(x') + \frac{\pi}{4}\right) & (x < x^{(c)}) \\ |Q|^{-1/2} \exp\left(\int_{x^{(c)}}^x dx' |Q(x')|\right) & (x > x^{(c)}) \end{cases} \quad (34)$$

3.4 WKB 1 次近似での量子化条件 (Bohr-Sommerfeld 量子化条件)

ポテンシャルが $\lim_{|x| \rightarrow \infty} V(x) > E$ を満たすとき、波動関数は $|x| \rightarrow \infty$ で減衰しなければならない。前章で導出した接続公式 (33) を用いると、量子化条件 (17) の WKB 1 次近似は次のように求められる。

$$\frac{1}{2\pi} \oint dx Q(x) = \frac{1}{\pi} \int_{x_L^{(c)}}^{x_R^{(c)}} dx Q(x) = n + \frac{1}{2} \quad (35)$$

ここで、 $x_L^{(c)}$, $x_R^{(c)}$ はそれぞれ左側、右側の古典的転回点を表す。これは、Bohr-Sommerfeld 量子化条件と呼ばれる。厳密な量子化条件 (17) と比較すると、積分区間が $x_L^{(c)}$ から $x_R^{(c)}$ までになり、無限遠で徐々に減衰する $K(x)$ が、古典的転回点で急にゼロになる $Q(x)$ で近似されている。右辺が、整数倍でないのは、波動関数が古典禁止領域にも十分にしみ出すことを意味している。図 2 の K と Q の違いに着目されたい。最後により高次の WKB 近似について言及しておく。高次の摂動での波数は、古典的転回点で発散してしまい、厳密な波数 $K(x)$ には漸近しない。これは WKB 法が特異摂動法だからであり、古典的運動量からの量子補正に失敗する。次章では、特異摂動法の枠内で量子補正を正しく行う方法を提示する。

4 Divergence-free WKB 法 (3 次の代数方程式に基づく WKB 法)

4.1 量子補正の繰り込み

シュレディンガー方程式 (linear Schrödinger equation : LSE) $\Psi'' + Q^2\Psi = 0$ (3) に $\Psi = e^\psi$ を代入すると次式になる。

$$(\psi')^2 + Q^2 = -\psi'' \quad (36)$$

各項の $\hbar$ の次数を考えると $\psi'' \propto \hbar^{-1}$, $(\psi')^2 \propto \hbar^{-2}$, $Q^2 \propto \hbar^{-2}$ である。WKB 法ではゼロ次は、 ψ'' を無視することにより、 ψ' の 2 次の代数方程式になる。われわれの方法では、 ψ'' を以下のようにして、近似すること無く方程式から消去する。まず、(36) 式の両辺を微分する。

$$2\psi'\psi'' + 2QQ' = -\psi''' \quad (37)$$

次いで、(37) 式を (36) 式に代入して、 ψ'' を消去することにより次式を得る。

$$(\psi')^3 + Q^2\psi' - QQ' = \psi'''/2 \quad (38)$$

ここで、各項の $\hbar$ の次数を考えると $(\psi')^3 \propto \hbar^{-3}$, $Q^2\psi' \propto \hbar^{-3}$, $QQ' \propto \hbar^{-2}$, $\psi''' \propto \hbar^{-1}$ である。次節で述べる Divergence-free WKB 近似では、 ψ''' を無視することにより、 ψ' の 3 次の代数方程式になる。 QQ' という項が量子補正を表している。 $\hbar \rightarrow 0$ 極限で QQ' という項を無視すると $[(\psi')^2 + Q^2]\psi' = 0$ となり、WKB 近似のゼロ次解 $\psi' = \pm iQ$ が得られる。

ところで、(38) 式は $\hbar \rightarrow 0$ 極限で $\psi' = \pm iQ$ の他に $\psi' = 0$ という解を余分に有する。この解の意味を調べるために (38) 式について、改めて考えてみる。(38) 式は元の LSE(36) に比べて微分の階数が 1 つ増加しており、LSE よりも幅広いクラスの方程式に広がっていることが予想される。事実、(38) 式は非線型シュレディンガー方程式 (nonlinear Schrödinger equation : NLSE) と等価である。実際、(38) 式を一回積分すると NLSE が導出される。

$$\Psi'' + Q^2\Psi = g\Psi^3 \quad (39)$$

ここで、 g は積分定数である。逆に、(39) 式から (38) 式を導出する際には、 g に関する情報は失われる。NLSE(39) は $g = 0$ という特別な場合として、LSE を含む。また、本論文の以下の部分では、NLSE の波動関数は 1 に規格化されているものとする $\left(\int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(x)|^2 = 1\right)$ 。一方、LSE の規格化因子は任意でよいとする。以下のサブセクションでは NLSE の解を 2 通りの方法で解析する。§4.1.1 では、NLSE を WKB 法と同様の方法で解き、LSE の解 (§3.1) と比較する。§4.1.2 では、NLSE を解くための新しい級数展開の方法を提示する。

4.1.1 非線型シュレディンガー方程式の 3 つの解

本節では、NLSE(38) を WKB 法と同様の方法で解き、§3.1 で述べられた LSE の WKB 展開 (22) ~ (26) と比較することにする。詳細な計算は、Appendix. A にて行う。その結果、(38) 式の基本解は 3 つあり、古典許容領域では、うち 1 つが実数解、残りの 2 つが互いに複素共役な解である。(古典禁止領域では、上記のそれぞれの解で $Q = -i|Q|$ と置き換えたものになる。) 複素共役な解は完全に、LSE の WKB 解と一致することが証明される。つまり、(22) ~ (26) 式と同じ解である。一方、実数解は次のように展開される。

$$\psi' = \sum_{n=0}^{\infty} \psi'_{2n+1} \quad (40)$$

ここで

$$\psi'_1 = \frac{Q'}{Q} = \frac{d}{dx} \ln \sqrt{|Q^2|} \quad (41)$$

$$\psi'_{2n+1} = \frac{1}{Q^2} \left(\frac{1}{2} \psi'''_{2n-1} - \sum_{k,l=1}^{(k+l) \leq 2n} \psi'_k \psi'_l \psi_{2n+1-(k+l)} \right) \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (42)$$

ψ'_3 まで求めておく。

$$\psi'_3 = \frac{1}{2Q^2} \left(\frac{Q'''}{Q} - 3 \frac{Q'Q''}{Q^2} \right) \quad (43)$$

但し、古典禁止領域 ($Q^2 < 0$) では、これらの式は $Q = -i|Q|$ とおけばよい。古典許容領域でも、古典禁止領域でも上の解は実数である。ここで、最初の項のみをとる近似 $\psi' \simeq \psi'_1$ を考えると、古典許容領域 ($Q^2 > 0$) ではよく知られた Thomas-Fermi (TF) 近似された解になっていることが分かる [7, 8]。

$$\Psi_{\text{TF}} = \sqrt{\frac{Q^2}{g}} = \sqrt{\frac{E - V}{g}}$$

これは、NLSE (39) の運動エネルギーゼロ近似に他ならない。この近似が成立するためには $|\psi'_1| \gg |\psi'_3|$ すなわち

$$\left| \frac{1}{QQ'} \left(\frac{Q'''}{Q} - 3 \frac{Q'Q''}{Q^2} \right) \right| \ll 1$$

が成立することが必要であるが、やはり古典的転回点近傍では破綻している。TF 近似もまた特異摂動法の一種なのである。

4.1.2 新しい WKB 法 (3 次の代数方程式に基づく WKB 法)

ここで、NLSE(38) に対して、新しい摂動展開の方法を提示する。この方法は、ゼロ次で (38) 式の右辺を無視し、 ψ' の 3 次方程式とする方法である。§4.1.1 での ψ のべき展開と区別するためにこの展開では次のような表記 φ'_n を用いる。

$$(\psi')^3 + Q^2 \psi' - QQ' = \lambda \psi''' / 2 \quad (44)$$

$$\psi' = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \varphi'_n \quad (45)$$

ゼロ次での解は、次の 3 次方程式を解くことにより得られる。

$$(\varphi'_0)^3 + Q^2 \varphi'_0 - QQ' = 0 \quad (46)$$

これが、この方法を「3 次の代数方程式に基づく WKB 法」と呼ぶ由縁である。(45) 式を (44) 式に代入して、 λ のべきで整理すると φ'_n ($n = 1, 2, \dots$) が得られる。

$$\varphi'_n = \frac{1}{3(\varphi'_0)^2 + Q^2} \left(\frac{1}{2} \varphi'''_{n-1} - 3\varphi'_0 \sum_{k=1}^{n-1} \varphi'_k \varphi'_{n-k} - \sum_{k,l=1}^{(k+l) \leq n-1} \varphi'_k \varphi'_l \varphi'_{n-(k+l)} \right) \quad (47)$$

例えば、 φ'_1 は $\varphi'_1 = \varphi'''_0 [(\varphi'_0)^2 + Q^2]^{-1/2}$ のように計算される。(46) 式を用いて、右辺を φ'_0 のみを用いて表すと次のようになる。

$$\varphi'_1 = -3\varphi'_0 (V')^2 \frac{\left(\varphi'_0 - \frac{V''}{2V'} \right)^2}{(3(\varphi'_0)^2 + Q^2)^4} + (V')^2 \frac{\varphi'_0 - \frac{V''}{2V'}}{(3(\varphi'_0)^2 + Q^2)^3} + \frac{V''}{2} \frac{\varphi'_0 - \frac{V''}{2V'}}{(3(\varphi'_0)^2 + Q^2)^2} \quad (48)$$

最後に、この展開もまた特異摂動法の一つであることを強調しておく。 $3(\varphi'_0)^2 + Q^2 = 0$ を満たす点で、摂動が破綻するからである。ところが、WKB 法とは違って、破綻しない解も存在する。このような解の場合、 $3(\varphi'_0)^2 + Q^2 = 0$ を満たす点が存在しない。詳細は、次節で述べる。

4.2 Divergence-free WKB 近似

§§4.1.1, 4.1.2の結果を復習する。§§4.1.1 では、NLSE を解くと、LSE の WKB 展開された式 (22) ~ (26) 及び NLSE の実数解 (41) ~ (43) が得られることが分かった。一方、§§4.1.2の方法で NLSE を解くときも、ゼロ次が 3 次方程式 (46) であるので、3 つの解が存在する。ここで、3 次方程式 (46) の 3 つの解が、§§4.1.1で得られる上述の 3 つの解と何らかの関係があると考えるのは自然である。つまり、3 次方程式 (46) を解くとき、LSE の近似解及び NLSE の実数解の近似が得られると期待できる。

本章の以下の部分では、§§4.1.2での展開のゼロ次 $\psi' \simeq \varphi'_0$ のみ残す近似を考える。§4.3 で見るように (46) 式が LSE および NLSE の uniformly valid な波動関数を導く。この意味で、今後この近似を「Divergence-free WKB 近似」と呼ぶことにする。(38) 式の各項の $\hbar$ の次数の評価により、 φ'_0 は $\hbar$ の非摂動展開であり、かつ $\hbar$ の最低次とその次の次数まで正しく含んでいることが分かる。よって、 φ'_0 だけを考えても、少なくとも WKB 1 次近似と同じ精度が期待できる。さらに、ゼロ次解には $\hbar$ の無限次までの効果 (非摂動的効果) が入っており、§4.3で見るように、この効果が古典的転回点での発散を除去する。ここで、この方法が WKB 法の自然な拡張になっていることを強調しておく。WKB 法における (18), (19) 式をそれぞれ (38), (46) 式と比較するとそのことがよく分かるであろう。

まず、3 次方程式 (46) を次のように書き換えておく。

$$(\varphi'_0)^3 + 3p\varphi'_0 + 2q = 0 \quad (49)$$

ここで p, q は次のように定義される。

$$p(x) \equiv \frac{Q^2}{3} = \frac{E - V}{3} \propto \hbar^{-2}, \quad q(x) \equiv -\frac{QQ'}{2} = -\frac{d}{dx} \frac{Q^2}{4} = \frac{V'}{4} \propto \hbar^{-2}$$

3 次方程式 (49) の解は、その判別式 $D \equiv p^3 + q^2$ が正のとき、1 つが実数解、残りの 2 つが互いに複素共役な解である。一方、判別式が負のとき、3 つの解はすべて実数解になる。判別式が正の領域で互いに複素共役な解は、判別式がゼロになる点で縮退し、判別式が負の領域になると実数解に変わる。この振る舞いは、WKB 法のゼロ次解 $\psi'_0 = \pm iQ$ の振る舞いと同じである。従って、これらの解にとって、判別式がゼロになる点は、WKB 法と全く同じ意味で重要である。

そこで、判別式 D がゼロになる点の位置を調べ、古典的転回点 $x^{(c)}$ と比較する。まず、判別式がゼロになる点が、必ず古典禁止領域に存在することが証明できる。何故ならば、 $D = p^3 + q^2 = 0 \Leftrightarrow (E - V)^3/3^3 = -(V')^2/4^2 \leq 0 \Leftrightarrow E \leq V$ だからである。次に、どの程度古典禁止領域へずれるのかを調べる。それには $D = 0$ が $|Q^2| \sim |Q'|$ と変形されることに着目する。これは ψ'_0 (22), ψ'_1 (23) から $|\psi'_0| \sim |\psi'_1|$ と解釈できる。つまり、判別式がゼロになる点は、WKB 展開の boundary layer の境界付近に位置すると言える。古典禁止領域で $\psi'_0 = -|Q|$ の寄与のみが重要になるとき ($|\psi'_0| \gg |\psi'_1|$)、確かに波動関数は指数関数的に減衰している。このことは、判別式がゼロになる点は量子論的なしみ出しの効

果も考慮に入れた転回点であることを示唆している。故にこの点を量子補正転回点 $x^{(q)}$ 、判別式が正である領域 ($D > 0$) を補正許容領域、判別式が負である領域 ($D < 0$) を補正禁止領域と呼んで、WKB 法における古典的転回点 $x^{(c)}$ 、古典許容領域 ($E > V$)、古典禁止領域 ($E < V$) とそれぞれ区別することにする。

例えば、線形ポテンシャルと調和振動子ポテンシャルに対しては厳密に量子補正転回点 $x^{(q)}$ を求めることができる。これらの場合の量子補正転回点を求めて、この量子補正転回点付近で波動関数がどの程度減衰しているかを調べる。まず、線形ポテンシャルの場合 (§2.3 参照)、 $Q^2 = -F(x - x^{(c)})$ ($F \equiv V'(x^{(c)}) > 0$) より p, q は次のようになる。

$$p = -F(x - x^{(c)})/3, \quad q = F/4$$

$D(x^{(q)}) = 0$ の実数解は、 $F^{1/3}(x^{(q)} - x^{(c)}) = 3/2^{4/3}$ となる。 $F > 0$ に対して、右辺は $x^{(q)} - x^{(c)}$ であるから、量子補正転回点は古典禁止領域にあることが分かる。§2.3 で定義したスケール $\xi \equiv F^{1/3}(x - x^{(c)})$ を用いて上式を書き換えると

$$\xi^{(q)} \equiv F^{1/3}(x^{(q)} - x^{(c)}) = 3/2^{4/3} \quad (50)$$

これは、(13) 式から分かるように $\text{Ai}(\xi)$ の減衰幅と同じオーダーであり、古典禁止領域へ侵入した波動関数が十分に減衰する点が $x^{(q)}$ となっていることが分かる。

次に、調和振動子ポテンシャルの場合 $Q^2 = E - x^2$ より p, q は次のようになる。

$$p = (E - x^2)/3, \quad q = x/2$$

$D(x^{(q)}) = 0$ は、 $[(x^{(q)})^2 - E]^3/3^3 = (x^{(q)})^2/2^2$ となる。ここで、 $\Delta \equiv \frac{2}{3}((x^{(q)})^2 - E)$ とおくと上式は Δ に関する 3 次方程式 $\Delta^3 - 3\Delta - 2E = 0$ になる。この 3 次方程式の判別式は $E^2 - 1 \geq 0$ であり、実数解は $\Delta = (E + \sqrt{E^2 - 1})^{1/3} + (E - \sqrt{E^2 - 1})^{1/3}$ である。故に、量子補正転回点 $(x^{(q)})^2 = E + \frac{3}{2}\Delta$ は次のように求まる。

$$x^{(q)} = \pm \sqrt{E + \frac{3}{2} \left[(E + \sqrt{E^2 - 1})^{1/3} + (E - \sqrt{E^2 - 1})^{1/3} \right]} \quad (51)$$

一方、古典的転回点は $x^{(c)} = \pm\sqrt{E}$ であるから、 $\Delta \sim E^{1/3}$ が量子補正転回点の古典的転回点からの量子補正によるシフトの度合を表している。一般のポテンシャル $V(x) = \sum_{n=0}^{\infty} V^{(n)}(x^{(c)})(x - x^{(c)})^n/n!$ に対しては、量子補正転回点は次のように展開される。

$$x^{(q)} - x^{(c)} \sim \frac{3}{2^{4/3}} \frac{1}{F^{1/3}} \left[1 + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{2n-3}{n!} \left(\frac{3}{2}\right)^{n-2} \frac{V^{(n)}(x^{(c)})}{[2F]^{(n+2)/3}} \right] \quad (52)$$

ここで、補正許容領域 ($D > 0$) での 3 次方程式 (49) の解について調べる。

$$\varphi'_0 = \begin{cases} -\kappa \\ \kappa/2 + ik \equiv \varphi'_+ \\ \kappa/2 - ik \equiv \varphi'_- \end{cases} \quad (53)$$

ここで κ, k は次式で定義される。

$$\kappa(x) \equiv (q + \sqrt{D})^{1/3} + (q - \sqrt{D})^{1/3}, \quad k(x) \equiv \frac{\sqrt{3}}{2} \left[(q + \sqrt{D})^{1/3} - (q - \sqrt{D})^{1/3} \right] \quad (54)$$

$\kappa(x)$ と波数 $k(x)$ は関係式 $k^2 - Q^2 = 3\kappa^2/4$ を満たすことを付記しておく。厳密解と比較するために $\hbar$ 展開を行う。

$$\kappa(x) = -\frac{Q'}{Q} + \frac{(Q')^3}{Q^5} + \mathcal{O}(\hbar^4) \quad , \quad k(x) = Q \left(1 + \frac{3}{8} \frac{(Q')^2}{Q^4} + \mathcal{O}(\hbar^4) \right)$$

展開の際 $p^{1/2} \sim \mathcal{O}(\hbar^{-1})$, $q/p^{3/2} \sim \mathcal{O}(\hbar^1)$ に注意する。これを用いて、(53) 式の解を $\hbar$ のべきで展開する。厳密な展開、(41),(43) あるいは (22),(23),(25),(26) と比較されたい。

$$\varphi'_0 = \begin{cases} -\kappa = & \frac{Q'}{Q} - \frac{(Q')^3}{Q^5} + \mathcal{O}(\hbar^4) \\ \varphi'_+ = & iQ \left(1 + \frac{3}{8} \frac{(Q')^2}{Q^4} \right) - \frac{Q'}{2Q} + \frac{(Q')^3}{2Q^5} + \mathcal{O}(\hbar^3) \\ \varphi'_- = & -iQ \left(1 + \frac{3}{8} \frac{(Q')^2}{Q^4} \right) - \frac{Q'}{2Q} + \frac{(Q')^3}{2Q^5} + \mathcal{O}(\hbar^3) \end{cases} \quad (55)$$

$Q \sim \mathcal{O}(\hbar^{-1})$, $Q'/Q \sim \mathcal{O}(\hbar^1)$, $Q^{-2} \sim \mathcal{O}(\hbar^2)$ に注意する。この結果、 $-\kappa$ は、 $\mathcal{O}(\hbar^0)$ のオーダーまでは、TF 解に一致し、 $\varphi'_\pm$ は、 $\mathcal{O}(\hbar^0)$ のオーダーまでは、WKB 解に一致していることが分かる。これらの解の非線型性を調べるために (55) 式を (39) 式 $g\Psi^2 = (\psi')^2 + \psi'' + Q^2 = (\psi'_0)^2 + \psi''_0 + Q^2 + \mathcal{O}(\hbar^0)$ に代入すると、次式を得る。

$$g\Psi^2 = \begin{cases} Q^2 + \mathcal{O}(\hbar^0) & \text{for } \varphi'_0 = -\kappa \\ \mathcal{O}(\hbar^0) & \text{for } \varphi'_0 = \varphi'_+ \\ \mathcal{O}(\hbar^0) & \text{for } \varphi'_0 = \varphi'_- \end{cases} \quad (56)$$

$Q^2 \sim \mathcal{O}(\hbar^{-2})$, $Q'/Q \sim \mathcal{O}(\hbar^0)$, $Q''/Q \sim \mathcal{O}(\hbar^0)$ に注意する。上式から、次のことが分かる。 $-\kappa$ は単独で NLSE($g \neq 0$) の近似解になりうる。一方、 e^{φ_+} 及び e^{φ_-} あるいは両者の線形結合は LSE($g = 0$) の近似解になりうる。

一方、補正禁止領域では 3 次方程式 (49) は 3 つの実数解をもつ。

$$\varphi'_0 = \begin{cases} \mp 2\sqrt{-p} \cos \left(\frac{1}{3} \text{Arctan} \frac{\sqrt{-D}}{|q|} \right) & = -\kappa \\ \mp 2\sqrt{-p} \cos \left(\frac{1}{3} \text{Arctan} \frac{\sqrt{-D}}{|q|} + \frac{2\pi}{3} \right) & \equiv \chi'_+ \\ \mp 2\sqrt{-p} \cos \left(\frac{1}{3} \text{Arctan} \frac{\sqrt{-D}}{|q|} - \frac{2\pi}{3} \right) & \equiv \chi'_- \end{cases} \quad (57)$$

ここで 符号 $-$ 及び $+$ はそれぞれ $V'(x) > 0$ 及び $V'(x) < 0$ の場合に対応している。§4.3での議論のために、次のことを強調しておく。上式中 $-\kappa$ は補正許容領域での解 $-\kappa(53)$ と連続である。ところが、残りの 2 つの解 $\chi'_\pm$ は補正許容領域での解 $\varphi'_\pm(53)$ と連続ではなく、量子補正転回点が特異点になっている。後者 ($\chi'_\pm$) の事情は、WKB 法のゼロ次と全く同じである。これらの解 (57) は $\hbar$ 展開されると次

のようになる。

$$\varphi'_0 = \begin{cases} -\kappa = \mp |Q| \left(1 + \frac{3}{8} \frac{(Q')^2}{Q^4} \right) - \frac{Q'}{2Q} + \frac{(Q')^3}{2Q^5} + \mathcal{O}(\hbar^3) \\ \chi'_+ = \pm |Q| \left(1 + \frac{3}{8} \frac{(Q')^2}{Q^4} \right) - \frac{Q'}{2Q} + \frac{(Q')^3}{2Q^5} + \mathcal{O}(\hbar^3) \\ \chi'_- = \frac{Q'}{Q} - \frac{(Q')^3}{Q^5} + \mathcal{O}(\hbar^4) \end{cases} \quad (58)$$

$|Q| \sim \mathcal{O}(\hbar^{-1})$, $Q'/Q \sim \mathcal{O}(\hbar^0)$, $Q^{-2} \sim \mathcal{O}(\hbar^2)$ に注意する。ここで $-\kappa$ および χ'_+ は $\mathcal{O}(\hbar^0)$ まで、共に WKB 解に一致していることが分かる。非線型性を調べるために、(58) 式を (39) 式 $g\Psi^2 = (\psi'_0)^2 + \psi''_0 + Q^2 + \mathcal{O}(\hbar^0)$ に代入して、次式を得る。

$$g\Psi^2 = \begin{cases} \mathcal{O}(\hbar^0) & \text{for } \varphi'_0 = -\kappa \\ \mathcal{O}(\hbar^0) & \text{for } \varphi'_0 = \chi'_+ \\ -|Q|^2 + \mathcal{O}(\hbar^0) & \text{for } \varphi'_0 = \chi'_- \end{cases} \quad (59)$$

$|Q|^2 \sim \mathcal{O}(\hbar^{-2})$, $Q'/Q \sim \mathcal{O}(\hbar^0)$, $Q''/Q \sim \mathcal{O}(\hbar^0)$ に注意する。(55),(56) 式と (58),(59) 式をそれぞれ比較されたい。補正許容領域での非線型解 $-\kappa$ の非線型性は正 ($g > 0$) であるが、一方、補正禁止領域での非線型解 χ'_- の非線型性は負 ($g < 0$) になっている。次の事実に特に注意すべきである。補正許容領域 (55) では φ'_+ , φ'_- が LSE の WKB 解に対応しているが、補正禁止領域 (58) では $-\kappa$, χ'_+ が LSE の WKB 解に対応している。WKB 近似と比較したとき、むしろ意外な結果であると言えるかもしれない。WKB 近似からの類推では、 χ'_+ , χ'_- に LSE の WKB 解に対応するものが現れる方が自然な気がするからである。

最後に、重要なことを指摘しておく。 $\varphi'_0 = \varphi'_\pm, \chi'_\pm$ に対しては量子補正転回点 $x^{(q)}$ で $(\varphi'_0)^2 + Q^2 = 0$ が成立し、 $\varphi'_1(48)$ は発散してしまう。これは、われわれの摂動展開もまた特異摂動法の一つであることの帰結である。ところが $\varphi'_0 = -\kappa$ に対しては、量子補正転回点 $x^{(q)}$ で $(\varphi'_0)^2 + Q^2 = -3Q^2$ が成立し、 $\varphi'_1(48)$ は発散しない。正則な解 $-\kappa$ の存在は、奇数次の方程式の特徴であるので驚くべきことではない。§4.3 では、この正則な解 $-\kappa$ により uniformly valid な波動関数が構成できることを示す。

4.3 Divergence-free WKB 近似での減衰解

本節では、3 次方程式 (49) の解を用いて、波動関数を構成しなければならない。つまり、§3.3 に相当することを非線型方程式で行わなければならない。まず、3 次方程式 (49) を用いて、NLSE の一般解を構成して、次いで接続問題を解いて未知定数を決定するというわけである。ところが、非線型方程式の一般解は未だよく知られていないのが現状であり、NLSE の一般解の構成は自明ではない。

そこで本論文では、次の 2 つの場合の波動関数を構成する。1 つは NLSE の基底状態 (実数解) で、もう 1 つは LSE の減衰解である。この 2 つの場合については、従来の知識から波動関数を構成できる。それでも、接続に関していくつか興味な点が残ることを予め述べておく。最終的には、NLSE の一般解の構成から行わなければ、問題が解けたことにはならないだろう。さて、以下に見るように、両者の接続の仕方は大きく異なるので、両者を並行に考えていくと、議論が混乱してしまう。そこで、§4.3, §4.4 では LSE の減衰解のみを考え、§4.5 で改めて NLSE の基底状態を考えたい。

まず、LSE の減衰解を考えるために $\lim_{x \rightarrow -\infty} V(x) < E$, $\lim_{x \rightarrow \infty} V(x) > E$ を満たすようなポテンシャルを考える。また、簡単のため、常に $V'(x) > 0$ とする。このとき波動関数は $x \rightarrow \infty$ で減衰しなければならない ($\lim_{x \rightarrow \infty} \Psi(x) = 0$)。従って、補正禁止領域では $-\kappa$ がゼロ次解 φ'_0 として選ばれなければならない。この事情に、前節での補正許容領域での議論を加えると、 $x > x^{(q)}$ で減衰する LSE の一般解は、次のように構成される。

$$\Psi_0(x) = \begin{cases} A_+ \exp\left(\int_{x^{(q)}}^x dx' \varphi'_+(x')\right) + A_- \exp\left(\int_{x^{(q)}}^x dx' \varphi'_-(x')\right) \equiv \Psi_I(x) & (x < x^0) \\ \exp\left(-\int_{x^{(q)}}^x dx' \kappa(x')\right) \equiv \Psi_{II}(x) & (x > x^0) \end{cases} \quad (60)$$

ここで Ψ_I と Ψ_{II} の接続点 x_0 は後に決定される。WKB 1 次近似と異なり、接続点が予め固定されないのは Ψ_{II} が量子補正転回点で破綻しないためである。

本節の以下の部分では A_+ , A_- および x_0 を求める。まず、この解を線形ポテンシャルの場合に適用し、その漸近形が、厳密解 $\text{Ai}(\xi)$ の漸近形と一致するように係数 A_+ , A_- の満たすべき関係を決める。これは、WKB 法 (§3.3) と同様の方法である。Appendix. B で見るように線形ポテンシャルの場合 $p = -F(x - x^{(c)})/3 = -F^{2/3}\xi/3$, $q = F/4$ に対して $-\kappa$, $\varphi'_\pm$, $\chi'_\pm$ は厳密に積分できる。それらの $|\xi| \gg 1$ における漸近形を (60) 式に代入すると次式が得られる。

$$\begin{cases} \Psi_I \sim 2^{1/3} \frac{(-\xi)^{-1/4}}{(2e)^{2/3}} \left[A_+ \exp\left(-i\left(\frac{2}{3}(-\xi)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right)\right) + A_- \exp\left(i\left(\frac{2}{3}(-\xi)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right)\right) \right] & (\xi < 0) \\ \Psi_{II} \sim 2^{-2/3} (2e)^{5/6} \xi^{-1/4} \exp\left(-\frac{2}{3}\xi^{3/2}\right) & (\xi > 0) \end{cases} \quad (61)$$

(61) 式を、Airy 関数 $\text{Ai}(\xi)$ の漸近形 (13) 式と一致させるためには、 A_+ と A_- は $A_+/A_- = -1$ という関係を満たさなければならない。このようにしてゼロ次解 (60) は次のようになる。

$$\Psi_0(x) = \begin{cases} \Psi_I(x) = A \exp\left(\frac{1}{2} \int_{x^{(q)}}^x dx' \kappa(x')\right) \sin\left(\int_{x^{(q)}}^x dx' k(x')\right) & (x < x_0) \\ \Psi_{II}(x) = \exp\left(-\int_{x^{(q)}}^x dx' \kappa(x')\right) & (x > x_0) \end{cases} \quad (62)$$

ここで、残る未知定数 $A \equiv \mp 2iA_\pm$ および x_0 は、 Ψ_I と Ψ_{II} および、両者の微分同士が x_0 で連続になるように決定されるのは自然なことである ($\Psi_I(x_0) = \Psi_{II}(x_0)$, $\Psi'_I(x_0) = \Psi'_{II}(x_0)$)。これにより x_0 と A は次の連立方程式を満たさなければならない。

$$\tan\left(\int_{x_0}^{x^{(q)}} dx k(x)\right) = \frac{2k(x_0)}{3\kappa(x_0)} \quad (63)$$

$$A = \exp\left(\frac{3}{2} \int_{x_0}^{x^{(q)}} dx \kappa(x)\right) \text{cosec}\left(\int_{x_0}^{x^{(q)}} dx k(x)\right) \quad (64)$$

(63) 式は x_0 のみに関する方程式である。この式から $x_0 < x^{(q)}$ を満たすような接続点の存在を証明できる。以上により接続問題が解かれたことになる。接続により得られた結果について重要なことを述べておく。特異摂動法に従って Ψ_I は量子補正転回点 $x^{(q)}$ 近傍で破綻してしまうが、 Ψ_I と Ψ_{II} を $x_0 < x^{(q)}$

で滑らかに接続することにより、量子補正転回点近傍で Ψ_I を使う必要が無くなり、結果として、波動関数 Ψ_0 (62) は uniformly valid になる。つまり、次の摂動 φ'_1 まで考えたとき、波動関数 Ψ_0 はすべての x に対して近似がよくなり、特異摂動法に見られるような発散はおこらない。より高次の摂動に関しても全く同様である。

(63) 式は線形ポテンシャルに対しては厳密に解かれ、接続点 x_0 は古典的転回点 $x^{(c)}$ に一致する ($x_0 = x^{(c)}$)。これを用いて (64) 式から $A = (2e)^{3/2}$ が求まる。これを漸近形 (61) 式に代入すると次式になる。

$$\Psi_0 = \begin{cases} \Psi_I \sim 2^{1/3}(2e)^{5/6}(-\xi)^{-1/4} \sin\left(\frac{2}{3}(-\xi)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) & (\xi < 0) \\ \Psi_{II} \sim \frac{1}{2}2^{1/3}(2e)^{5/6}\xi^{-1/4} \exp\left(-\frac{2}{3}\xi^{3/2}\right) & (\xi > 0) \end{cases} \quad (65)$$

この漸近形は、位相だけでなく Ψ_I と Ψ_{II} の大きさの比も厳密解 (13) と一致していることが分かる。なお、一般のポテンシャルに対しては接続点 x_0 は、ニュートン法 (ゼロ次を古典的転回点 $x^{(c)}$ とする) により、次のように近似される。

$$x_0 - x^{(c)} \sim \frac{2^{4/3}\sqrt{3}}{F^{1/3}} \left(\int_{x^{(c)}}^{x^{(q)}} dx k(x) - \frac{\pi}{6} \right) \quad (66)$$

つまり、(52), (66) 式から $x^{(q)} - x^{(c)}$ と $x_0 - x^{(c)}$ の比は $1 : \left(\int_{x^{(c)}}^{x^{(q)}} dx k(x) - \frac{\pi}{6} \right)$ のオーダーである。

4.4 Divergence-free WKB 近似での量子化条件

本節では、 $\lim_{|x| \rightarrow \infty} V(x) > E$ を満たすようなポテンシャルを考えて、Divergence-free WKB 近似での量子化条件を導く。ゼロ次解 Ψ_I (62) がすべてのポテンシャルに対して量子補正転回点 $x^{(q)}$ でゼロになっていることから、量子化条件 (17) の Divergence-free WKB 近似は次のように得られる。

$$\frac{1}{2\pi} \oint dx k(x) = \frac{1}{\pi} \int_{x_L^{(q)}}^{x_R^{(q)}} dx k(x) = n + 1 \quad (67)$$

ここで、 $x_L^{(q)}, x_R^{(q)}$ はそれぞれ左側、右側の量子補正転回点を表す。厳密な量子化条件 (17) と比較すると、積分区間が $x_L^{(q)}$ から $x_R^{(q)}$ までになり、波数が無限遠で徐々に減衰する $K(x)$ が量子補正を含む量子補正転回点で急にゼロになる $k(x)$ で近似されている。 $k(x)$ は $Q(x)$ に比べて、量子補正分だけ $K(x)$ に近付いていると言える。 $K, Q, K_3 \equiv k$ に関する関係は、図 2 を参照されたい。 K_4 は、第 6 章で紹介される 4 次の代数方程式に基づく近似である。なお、右辺が、整数倍であるのは、 Ψ_I にとって $x^{(q)}$ が固定端となっていることの帰結である。(62) 式参照。これに対して、半整数値を与えるボーア・ゾンマーフェルトの量子化条件 (35) は、古典禁止領域への波動関数の浸みだしの効果を古典的転回点における位相のずれ $\pi/4$ として取り込んでいる。

4.5 非線型シュレディンガー方程式の基底状態

本節では、NLSE の基底状態のみを考えたい。NLSE の基底状態は近年ボーズ・アインシュタイン凝縮 (BEC) のオーダーパラメータに関して注目が集まっており、近似解、数値解が得られている [8, 12]。ま

ず、§4.3と同様に $\lim_{x \rightarrow -\infty} V(x) < E$, $\lim_{x \rightarrow \infty} V(x) > E$ を満たすようなポテンシャルを考える。(簡単のため、 $V'(x) > 0$) このとき 波動関数は $x \rightarrow \infty$ で減衰しなければならないので補正禁止領域では $\varphi'_0 = -\kappa$ が選ばれる。ここで、補正禁止領域で線型方程式 (LSE) と同じ解を選ぶこと、及び (59) 式によると $-\kappa$ に対して $g\Psi^2 = \mathcal{O}(\hbar^0)$ であることについて、不自然な感じがするかもしれない。これらのことに関しては、次のように説明できる。まず、NLSE は、波動関数が十分減衰する領域では、線型方程式 (LSE) に漸近する。故に、両者の減衰形が同じであるのは不自然なことではない。さらに、(59) 式では $g\Psi^2 = \mathcal{O}(\hbar^0)$ となっているが、NLSE の場合には、補正禁止領域で波動関数が十分減衰していること ($\Psi^2 \rightarrow 0$) を意味するのであって、 $g = 0$ を意味するものではない。

また、補正許容領域では、非線型性 (56) から、 $\varphi'_0 = -\kappa$ が選ばれ、結局、NLSE の基底状態は次のように構成される。

$$\Psi_0^{\text{NL}}(x) = N \exp \left(- \int_{x(q)}^x dx' \kappa(x') \right) \quad (68)$$

ここで N は規格化因子。上のゼロ次解は、補正許容領域、補正禁止領域に対してともに有効である。しかも、正則な解 $-\kappa$ を用いているので波動関数 Ψ_0^{NL} は uniformly valid な解である。つまり、次の摂動 φ'_1 を考えたとき、波動関数 Ψ_0^{NL} はすべての x に対して近似がよくなり、特異摂動法に見られるような発散はおこらない。

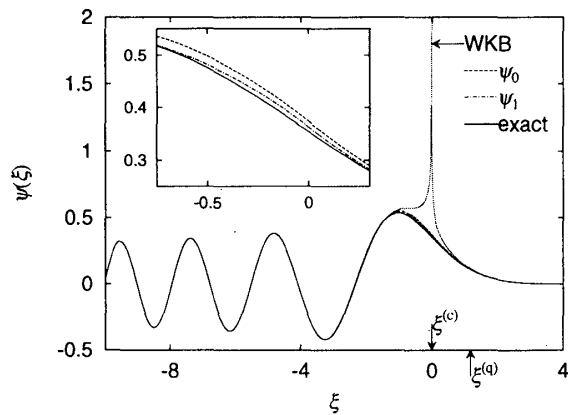
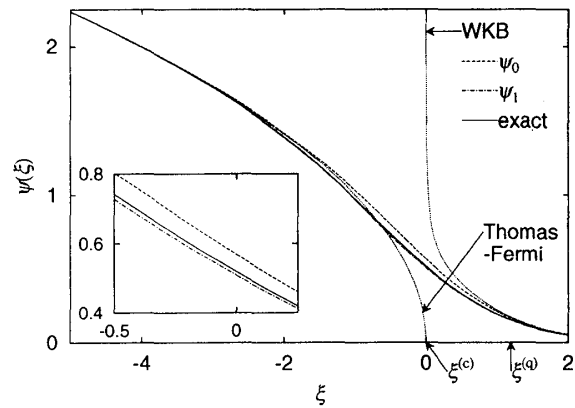
5 結果と考察

5.1 Divergence-free WKB 近似波動関数の特徴

本章では、第4章で得られたゼロ次解 $\Psi_0(x)$ 及び1次解 $\Psi_1(x)$ を線形ポテンシャル (§5.2)、調和振動子ポテンシャル (§5.3)、モース・ポテンシャル (§5.4) に適用する。1次解 $\Psi_1(x)$ は、第4章での議論で φ'_0 のかわりに $\varphi'_0 + \varphi'_1$ を用いることで得られる。また、厳密解および WKB 1次解 (但し、NLSE の場合には TF 解、及び WKB 1次解が組み合わされたもの) と比較されている。図4～7及び、図10によって示されるように、われわれのゼロ次解 $\Psi_0(x)$ 及び1次解 $\Psi_1(x)$ はすべての座標で発散しない。誤差は古典的転回点の近傍でのみ無視できないが、この誤差は、1次解では十分に改善されていることが同図から見てとれる。つまり、uniformly valid な波動関数が得られていることが分かる。また、調和振動子ポテンシャルやモース・ポテンシャルのようないくつかの典型的なポテンシャルに対しては、量子化条件 (67) に現われる積分を3次方程式 (49) に基づいて実行することができる。その結果、現在、これら2つのポテンシャルについては厳密なエネルギー固有値が得られることが確認できた。

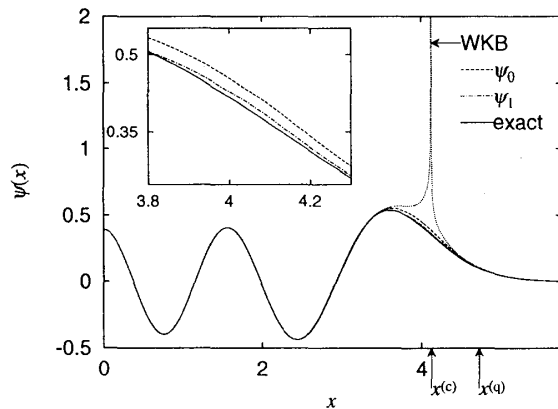
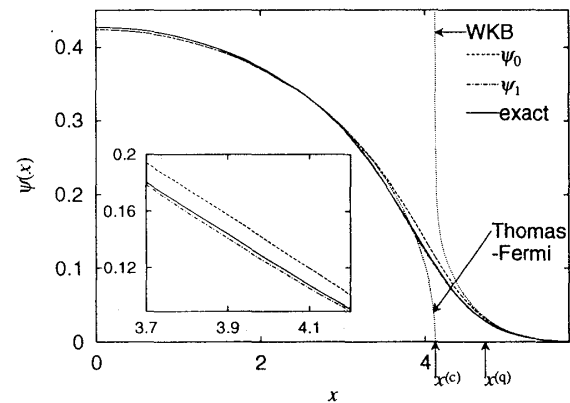
5.2 線形ポテンシャル

ポテンシャルが線形な NLSE は $-d^2\Psi/d\xi^2 + \xi\Psi + g\Psi^3 = 0$ で与えられる。 $g = 0$ (LSE) の場合は図4に、 $g = 1$ (NLSE) の場合は図5に図示されている。NLSE の数値解は Dalfovo らの方法によって得られた [12]。 $g = 1$ のとき、この式はパルルヴェ方程式 (II 型) と呼ばれる方程式である。


 図 4: 線形ポテンシャル (LSE) $\xi^{(q)} = 3/2^{4/3}$

 図 5: 線形ポテンシャル (NLSE) $\xi^{(q)} = 3/2^{4/3}$

5.3 調和振動子ポテンシャル

ポテンシャルが調和振動子の場合、NLSE は $-d^2\Psi/dx^2 + x^2\Psi + g\Psi^3 = E\Psi$ で与えられる。 $g = 0$ (LSE) の場合は図 6 に、 $g \neq 0$ (NLSE) の場合は図 7 に図示されている。NLSE の数値解は Dalfovo らの方法によって得られた [12]。この NLSE は、近年 BEC との関連で興味が集まっている。


 図 6: 調和振動子ポテンシャル (LSE) $E = 17$

 図 7: 調和振動子ポテンシャル (NLSE) $E = 17$

本節の以下の部分では、調和振動子ポテンシャルに対して我々の新しい量子化条件 (67) により厳密なエネルギー固有値 $E = 2n + 1$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) が得られることを示す。量子化条件 (67) の左辺 ($I(E)$ とおく) は、 x を複素数に拡張することにより次のように書き換えられる。

$$I(E) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma} dx y(x) = n + 1 \quad (69)$$

ここで、複素関数 $y(x)$ は 3 次の代数方程式 (49) を満たす。

$$y^3 + (E - x^2)y + x = 0 \quad (70)$$

また、経路 γ は図 8 に示されるように、2つの量子補正転回点間のカットを囲むような経路である。因みに、量子転回点 x_L, x_R は (70) 式 $y = y(x)$ の分岐点で与えられる (具体的には (51) 式参照)。ここで、逆関数 $x = x(y)$ を考え、(69),(70) 式をそれぞれ次のように変形する。

$$I(E) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} dy y \frac{d}{dy} x(y) \quad (71)$$

$$x^2 - y^{-1}x - (y^2 + E) = 0 \quad (72)$$

このとき経路 γ は、経路 Γ に写像される (図 9 参照)。ここで、 $y = \pm ia, \pm ib$ は (72) 式 $x = x(y)$ の分岐点で与えられ、具体的には、 $a \equiv [(E - \sqrt{E^2 - 1})/2]^{1/2}$, $b \equiv [(E + \sqrt{E^2 - 1})/2]^{1/2}$ となっている。このとき、経路 Γ の外側には、 $x = x(y)$ の特異点がたった 1 個だけ存在する。それは、無限遠点 $y = \infty$ である。ゆえに、以下に計算されるように、経路 Γ を無限遠点 $y = \infty$ のまわりの微小経路へと変形することができる。

$$\begin{aligned} I(E) &= \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} dy y \frac{dx}{dy} \\ &= \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} dy \left\{ -\frac{1}{2y} + \left(y - \frac{1}{4y^3} \right) \left(1 + E \frac{1}{y^2} + \frac{1}{4y^4} \right)^{-1/2} \right\} \\ &= \frac{1}{2} + \text{Res} \left[\left(y - \frac{1}{4y^3} \right) \left(1 + E \frac{1}{y^2} + \frac{1}{4y^4} \right)^{-1/2} ; y = \infty \right] \\ &= (1 + E)/2 \end{aligned}$$

故に、量子化条件 (69) は厳密なエネルギー固有値 $E = 2n + 1$ を与える。

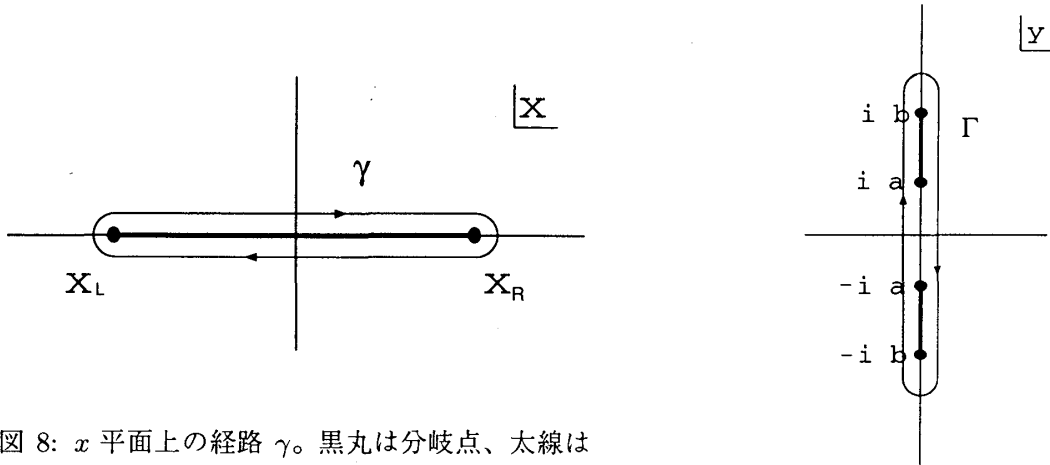
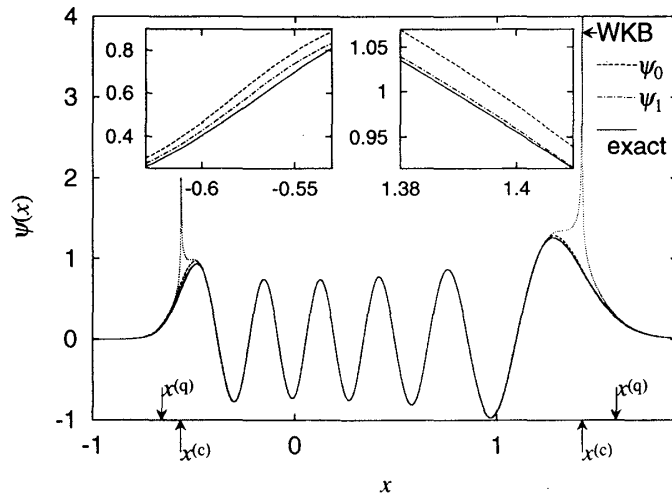


図 8: x 平面上の経路 γ 。黒丸は分岐点、太線はカットを表す。

図 9: 経路 Γ 。黒丸は分岐点、太線はカット。

5.4 モース・ポテンシャル

モース・ポテンシャルは $V = A^2[\exp(-2x) - 2\exp(-x)]$ で与えられる。 $g = 0$ (LSE) の場合は、図 10 に図示されている。また、§5.3 と同様の方法で、モース・ポテンシャルに対する量子化条件 (67) は厳密

図 10: モース・ポテンシャル (LSE) $A = 30, n = 10$

な結果 $E = -[A - (n + 1/2)]^2$ を与えることが確認されている。ここで、 n は正の整数でゼロから始まり、 $n + 1/2 < A$ を満足する最大値までの値をとる。

6 総括と展望

本章では、本論文の締めくくりとして、得られた結果を概観し、今後の課題について述べることにする。われわれは、LSE と NLSE を同じ方法から求めるという新しい半古典的方法論の研究を行ってきた。この方法のポイントは、量子補正を特異摂動法のゼロ次解に繰り込んでしまうという点にある。この量子補正の結果、ゼロ次解が満たす代数方程式の次数は、“2 次” (21) から “3 次” (46) にあがる。その結果、転回点付近の量子補正、特に古典禁止領域への波動関数の浸みだしの効果を十分な精度でとりこむことができた。そればかりではなく、3 次方程式の正則な解 $-\kappa$ を用いて、LSE および NLSE の uniformly valid な解を構成することができた。

さらに、この方法を繰り返すと、高次の量子補正をゼロ次解にどんどん繰り込んでいける。例えば、今回求めたもの (第 4, 5 章) よりもさらに量子補正を繰り込むには次のようにすればよい。まず、(38) 式の両辺を微分する。

$$3(\psi')^2\psi'' + (E - V)\psi'' - V'\psi' + V''/2 = \psi^{(4)}/2 \quad (73)$$

これに、(36) 式を代入すると

$$3(\psi')^4 + 4(E - V)(\psi')^2 + V'\psi' + (E - V)^2 - V''/2 = -\psi^{(4)}/2 \quad (74)$$

ここでも、右辺 $\psi^{(4)}$ を無視することにより、ゼロ次解が得られる。ゼロ次解は “4 次” 方程式を満たす。この 4 次方程式から得られる波数を K_4 とする。線形ポテンシャルの場合には、図 2 のように振る舞う。

K_3 と比較すると、転回点の位置がさらに遠方になり、 K_4 は変曲点をもつようになっている。各項の $\hbar$ の次数を調べてみると、 $(\psi')^4 \propto \hbar^{-4}$, $(E-V)(\psi')^2 \propto \hbar^{-4}$, $V'\psi' \propto \hbar^{-3}$, $(E-V)^2 \propto \hbar^{-4}$, $V'' \propto \hbar^{-2}$ のようになっている。さらに、(74) 式を微分して、(36) 式を代入という操作を繰り返していくと一般に

$$(\psi')^n + \sum_{m=0}^{n-2} a_m(x)(\psi')^m = \frac{(-1)^{n-1}}{(n-1)!} \psi^{(n)} \quad (75)$$

が得られる。ここでも、右辺 $\psi^{(n)}$ を無視することにより、ゼロ次解は“ n 次”方程式を満たす。この n 次方程式から得られる波数を K_n とする。このように、量子補正を高次まで繰り込んでいったとき、転回点はどのようにして無限遠に近付いていくか、あるいは、量子化条件が厳密な量子化条件 (17) にどのように近付いていくかを調べてみるのは興味深いことである。量子化条件 (17) 及び Bohr-Sommerfeld 量子化条件 (17) のより深い理解につながることを期待される。

本論文では、NLSE の実数解 (§4.5) および LSE (§4.3) の減衰解を構成した。しかし、その接続に曖昧さが残った。最終的には NLSE の一般解から構成しなおさなければならないだろう。この NLSE の一般解は当然、何らかの極限として NLSE の実数解および LSE の減衰解を内を含むようなものになるはずである。ここで、NLSE の一般解について少し考察してみる。NLSE の一般解は、(38) 式の 3 つの解 (うち 2 つが LSE (36) の解、残り 1 つが NLSE の実数解) を用いて構成されるものと思われる。これらの 3 つの解 ψ' を積分するときに未知定数が 3 つ現れるが、そのうち 1 つは非線型パラメータ g ((39) 式参照) と関連しているはずなので、実質的には波動関数を構成する際の未知定数は 2 つとなり、NLSE (39) が 2 階の微分方程式であることと矛盾しない。しかし、LSE の場合と違って、NLSE に対しては、解の線形結合が許されないために、どのようにして一般解を構成するかは自明ではない。この問題に合理的な解答を見出すことは今後の重要な課題であると思われる。最終的には §4.3~§4.5 は、まず、NLSE の一般解を構成し、その後で、NLSE の実数解および LSE の減衰解が NLSE の一般解の何らかの極限として導出されるというように発展されるべきである。本研究が、NLSE の解に関するより包括的な理論へと発展する端著となるかもしれない。

A 非線形シュレディンガー方程式の厳密解

本章では、NLSE と等価な (38) 式から、NLSE の級数展開された厳密解について調べる。本章の結果は、非線型方程式のより深い理解につながる可能性があると思われる。

まず、“small” parameter λ を導入して (38) 式を次のように書き改める。

$$(\psi')^3 + Q^2\psi' = \lambda QQ' + \lambda^2\psi'''/2 \quad (76)$$

また、級数を $\psi' = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \psi'_n$ とおいて (76) 式に代入し、 λ のべき級数展開を求めた後で $\lambda = 1$ とおく。展開のゼロ次では、次式が得られる。

$$(\psi'_0)^3 + Q^2\psi'_0 = 0 \quad (77)$$

この解は、 $\psi'_0 = 0$, $\psi'_0 = \pm iQ$ の 3 通りがある。前者の場合の解を §A.1 で、後者の場合を §A.2 で考える。

(76) 式の右辺の効果を逐次取り入れていくと、前者をもとに逐次近似された解は実数解になり (§A.1)、後者をもとに逐次近似された解は WKB 解と完全に一致することを示す (§A.2)。

A.1 非線形シュレディンガー方程式の実数解

$\psi'_0 = 0$ をゼロ次として (76) 式を逐次近似により解くと ψ'_1, ψ'_n ($n = 2, 3, \dots$) はそれぞれ次のように求まる。

$$\psi'_1 = \frac{Q'}{Q} = \frac{d}{dx} \ln \sqrt{|Q^2|} \quad (78)$$

$$\psi'_n = \frac{1}{Q^2} \left(\frac{1}{2} \psi'''_{n-2} - \sum_{k,l=1}^{(k+l) \leq n-1} \psi'_k \psi'_l \psi'_{n-(k+l)} \right) \quad (79)$$

ここで、 λ の偶数乗のべきを考える。(79) 式で $n = 2m$ とおくと

$$\psi'_{2m} = \frac{1}{Q^2} \left(\frac{1}{2} \psi'''_{2(m-1)} - \sum_{k,l=1}^{(k+l) \leq 2m-1} \psi'_k \psi'_l \psi'_{2m-(k+l)} \right)$$

今、仮に $\psi'_{2m} = 0$ ($m = 0, 1, \dots, N-1$) とすると

$$\psi'_{2N} = \frac{1}{Q^2} \left(\frac{1}{2} \psi'''_{2(N-1)} - \sum_{k,l=1}^{(k+l) \leq 2N-1} \psi'_k \psi'_l \psi'_{2N-(k+l)} \right) = 0$$

が証明される。というのは、 $\psi'_{2(N-1)} = 0$ であつ、3つの整数 $k, l, 2N - (k+l)$ はすべて奇数になりえず、 $\psi'_k, \psi'_l, \psi'_{2N-(k+l)}$ のいずれかはゼロとなるからである。従つて、 $\psi'_{2n} = 0$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) である。よつて、級数は λ の奇数べきのみで展開できる。

$$\psi' = \sum_{m=0}^{\infty} \lambda^{2m+1} \psi'_{2m+1} \quad (80)$$

λ の奇数乗のべきを考えると、(79) 式で $n = 2m+1$ とおくと ψ'_{2m+1} ($m = 1, 2, \dots$) が得られる。

$$\psi'_{2m+1} = \frac{1}{Q^2} \left(\frac{1}{2} \psi'''_{2m-1} - \sum_{k,l=1}^{(k+l) \leq 2m} \psi'_k \psi'_l \psi'_{2m+1-(k+l)} \right) \quad (81)$$

古典許容領域 ($Q^2 > 0$) でも、古典禁止領域 ($Q^2 < 0$) でも ψ'_1 が実数であることから、 $\psi'_3, \psi'_5, \dots$ が実数であることが順に証明できる。故に、この解は実数解である。

A.2 非線形シュレディンガー方程式の複素共役な解

$\psi'_0 = \pm iQ$ をゼロ次として (76) 式を逐次近似により解くと ψ'_1, ψ'_n ($n = 2, 3, \dots$) はそれぞれ次のように求まる。

$$\psi'_1 = -\frac{Q'}{2Q} = \frac{d}{dx} \ln \frac{1}{\sqrt[3]{|Q^2|}} \quad (82)$$

$$\psi'_n = -\frac{1}{2Q^2} \left(\frac{1}{2} \psi'''_{n-2} - 3\psi'_0 \sum_{k=1}^{n-1} \psi'_k \psi'_{n-k} - \sum_{k,l=1}^{(k+l) \leq n-1} \psi'_k \psi'_l \psi'_{n-(k+l)} \right) \quad (83)$$

(82) 式は、明らかに LSE の WKB 解 (23) 式と一致している。以下では (83) 式も LSE の WKB 解 (24)

$$\psi'_n = -\frac{1}{2\psi'_0} \left(\psi''_{n-1} + \sum_{m=1}^{n-1} \psi'_m \psi'_{n-m} \right) = \frac{1}{2Q^2} \left(\psi'_0 \psi''_{n-1} + \psi'_0 \sum_{m=1}^{n-1} \psi'_m \psi'_{n-m} \right) \quad (84)$$

($n = 2, 3, \dots$) と一致することを証明する。

本節では、両者を区別するために、NLSE の解 (83) には、以下のように $\bar{\psi}$ をつけて区別する。

$$\bar{\psi}'_n = -\frac{1}{2Q^2} \left(\frac{1}{2} \bar{\psi}'''_{n-2} - 3\psi'_0 \sum_{k=1}^{n-1} \bar{\psi}'_k \psi'_{n-k} - \sum_{k,l=1}^{(k+l) \leq n-1} \bar{\psi}'_k \bar{\psi}'_l \psi'_{n-(k+l)} \right) \quad (85)$$

数学的帰納法に従って、上の命題を証明するためには、「今、 $\bar{\psi}'_n = \psi'_n$ ($n = 0, 1, 2, 3, \dots, N-1$) であると仮定したときに、 $\bar{\psi}'_N = \psi'_N$ であること」を証明できればよい。つまり、(84) 式 ($n = 0, 1, 2, \dots, N-1$) を用いて次の (86), (87) 式が等しいことを証明する。

$$2Q^2 \bar{\psi}'_N = -\frac{1}{2} \bar{\psi}'''_{N-2} + 3\psi'_0 \sum_{k=1}^{N-1} \bar{\psi}'_k \psi'_{N-k} + \sum_{k,l=1}^{(k+l) \leq N-1} \bar{\psi}'_k \bar{\psi}'_l \psi'_{N-(k+l)} \quad (86)$$

$$2Q^2 \psi'_N = \psi'_0 \psi''_{N-1} + \psi'_0 \sum_{m=1}^{N-1} \psi'_m \psi'_{N-m} \quad (87)$$

そのためには、(84) 式 ($n = 0, 1, 2, \dots, N-1$) を使って

$$\psi'_0 \psi''_{N-1} = -\frac{1}{2} \psi'''_{N-2} + 2\psi'_0 \sum_{k=1}^{N-1} \psi'_k \psi'_{N-k} + \sum_{k,l=1}^{(k+l) \leq N-1} \psi'_k \bar{\psi}'_l \psi'_{N-(k+l)} \quad (88)$$

が証明できればよい。(88) 式が証明できれば、明らかに (86) 式と (87) 式は等価、すなわち $\bar{\psi}'_N = \psi'_N$ だからである。故に、本節の以下の部分は、(84) 式 ($n = 0, 1, 2, \dots, N-1$) を使って (88) 式を導出することに割く。

まず、(84) 式

$$\psi'_0 \psi'_n = -\frac{1}{2} \left(\psi''_{n-1} + \sum_{m=1}^{n-1} \psi'_m \psi'_{n-m} \right) \quad (n = 1, 2, \dots, N-1)$$

の両辺を微分して次式が得られる。

$$\psi'_0 \psi''_n = -\frac{1}{2} \psi'''_{n-1} - \sum_{m=0}^{n-1} \psi''_m \psi'_{n-m} \quad (n = 1, 2, \dots, N-1) \quad (89)$$

一方、(84) 式

$$\psi''_{n-1} = -2\psi'_0 \psi'_n - \sum_{k=1}^{n-1} \psi'_k \psi'_{n-k} \quad (n = 1, 2, \dots, N-1)$$

で、 $n = m+1$ とおくと次式が得られる。

$$\psi''_m = -2\psi'_0 \psi'_{m+1} - \sum_{k=1}^m \psi'_k \psi'_{m+1-k} \quad (m = 0, 1, \dots, N-2) \quad (90)$$

ここで、(90) 式を (89) 式に代入して ψ_m'' を消去すると次式になる。

$$\psi_0' \psi_n'' = -\frac{1}{2} \psi_{n-1}''' + 2\psi_0' \sum_{m=1}^n \psi_m' \psi_{n+1-m}' + \sum_{k,l=1}^{(k+l) \leq n} \psi_k' \psi_l' \psi_{n+1-(k+l)}' \quad (91)$$

($n = 0, 1, \dots, N-1$)。ここで、(91) 式は、 $n = N-1$ のときには (88) 式となる。古典禁止領域では、 $Q = -i|Q|$ とおきかえれば同じ議論が可能である。以上から、NLSE の解 (83) が、LSE の WKB 解 (24) と一致することが証明できた。

B 線形ポテンシャルの場合の Divergence-free WKB 近似での波動関数

(53), (57) 式は、線形ポテンシャル $Q^2 = F(x - x^{(c)})$ ($F \equiv V'(x^{(c)})$) の場合には厳密に積分することができる。本章では、その計算の詳細、および、漸近形を提示する。ところで、線形ポテンシャルの場合の WKB 1 次近似での波動関数は、積分形で書かれた厳密解 $A_i(\xi)$ を鞍点近似したもの他にない。では、Divergence-free WKB 近似での波動関数は、厳密解 $A_i(\xi)$ にどのような近似を施したものなのだろうか？ 現在のところ、明らかではないが、鞍点近似をこえる近似法の提案につながる可能性もあると思われる。

最初に、§B.1, B.2 で用いられる表記法について説明しておく。 $\xi \equiv F^{1/3}(x - x^{(c)})$ でスケールすると p, q, D はそれぞれ

$$p = -\frac{F^{2/3}}{3}\xi, \quad q = \frac{F}{4}, \quad D = F^2 \left(\frac{1}{24} - \frac{\xi^3}{3^3} \right)$$

となる。§B.1, B.2 では、次のスケール t で計算する方が便利である。

$$t \equiv \frac{2^{4/3}}{3}\xi = \frac{2^{4/3}}{3}F^{1/3}(x - x^{(c)})$$

このスケールでの量子補正転回点は $t^{(q)} \equiv \frac{2^{4/3}}{3}\xi^{(q)} = 1$ となる。このとき p, q, D はそれぞれ次のようになる。

$$p = -\left(\frac{3}{4}\right)^2 a^2 t, \quad q = \left(\frac{3}{4}\right)^3 a^3, \quad D = \left(\frac{3}{4}\right)^6 a^6 (1 - t^3)$$

ここで $a \equiv \frac{2^{4/3}}{3}F^{1/3}$ 。

B.1 補正許容領域での波動関数

(54) 式 κ, k は線形ポテンシャルの場合、次のようになる。

$$\kappa(x) = \frac{3}{4}a(u+v), \quad k(x) = \left(\frac{3}{4}\right)^{3/2} a(u-v) \quad (92)$$

ここで、 u, v は、 $u \equiv (1 + \sqrt{1 - t^3})^{1/3}$, $v \equiv (1 - \sqrt{1 - t^3})^{1/3}$ で定義される。次に、 u, v の t に関する不定積分をそれぞれ、 $I_u(t) \equiv \int dt (1 + \sqrt{1 - t^3})^{1/3}$, $I_v(t) \equiv \int dt (1 - \sqrt{1 - t^3})^{1/3}$ とおくと、 κ, k の x に関する不定積分は次のように書ける。

$$I_\kappa(x) = \int dx \kappa(x) = \frac{3}{4}(I_u + I_v), \quad I_k(x) = \int dx k(x) = \left(\frac{3}{4}\right)^{3/2} (I_u - I_v) \quad (93)$$

以下では、 I_u, I_v を計算する。まず、 I_u を計算する。 $y = \sqrt{1-t^3}$ により変数変換する。 $t = (1-y^2)^{1/3}$ より

$$\begin{aligned}
 I_u &= \int dt (1+y)^{1/3} \\
 &= \int dy \frac{dt}{dy} (1+y)^{1/3} \\
 &= \int dy \left[\frac{d}{dy} (1-y^2)^{1/3} \right] (1+y)^{1/3} \\
 &= (1-y^2)^{1/3} (1+y)^{1/3} + \frac{1}{3} \int dy \left(\frac{y-1}{y+1} \right)^{1/3} \\
 &= \frac{1}{3} \left[2tu + \ln(u+v) - \frac{2}{\sqrt{3}} \text{Arctan} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} - \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{v}{u} \right) \right]
 \end{aligned} \tag{94}$$

全く同様にして、 v も積分される。

$$I_v = \frac{1}{3} \left[2tv + \ln(u+v) + \frac{2}{\sqrt{3}} \text{Arctan} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} - \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{v}{u} \right) \right] \tag{95}$$

以上 (93), (94), (95) 式から $I_\kappa(x), I_k(x)$ が求まる。

$$I_\kappa(x) = \frac{1}{2}t(u+v) + \frac{1}{2} \ln(u+v) \quad , \quad I_k(x) = \frac{\sqrt{3}}{4}t(u-v) - \frac{1}{2} \text{Arctan} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} - \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{v}{u} \right) \tag{96}$$

転回点 $x^{(q)}$ で $t=1, u(1)=v(1)=1$ であるから $I_\kappa(x^{(q)}) = 1 + \frac{1}{2} \ln 2$ $I_k(x^{(q)}) = \pi/12$ となり、故に、転回点 $x^{(q)}$ からの定積分は次のようになる。

$$\int_{x^{(q)}}^x dx' \kappa(x') = \frac{1}{2}t(u+v) + \frac{1}{2} \ln(u+v) - 1 - \frac{1}{2} \ln 2 \tag{97}$$

$$\int_{x^{(q)}}^x dx' k(x') = \frac{\sqrt{3}}{4}t(u-v) - \frac{1}{2} \text{Arctan} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} - \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{v}{u} \right) - \frac{\pi}{12} \tag{98}$$

これらを (68), (60) 式、あるいは (62) 式に代入すれば、補正許容領域での波動関数が得られる。

B.2 補正禁止領域での波動関数

補正禁止領域では次の不定積分を考える。

$$I_j(x) \equiv \int dx \chi'_j(x) \quad (j = -1, 0, 1) \tag{99}$$

ここで

$$\chi'_j = -\frac{3}{2}a\sqrt{t} \cos(\alpha) \quad , \quad \alpha \equiv \frac{1}{3} \text{Arctan} \sqrt{t^3-1} + \frac{2\pi}{3}j$$

これを (99) に代入すると $I_j(x) = -\frac{3}{2} \int dt t^{1/2} \cos \alpha$ となる。ここで、 t から α への変数変換を行う。

$$t^{-3/2} = \cos 3\alpha, \quad \frac{1}{2}t^2 dt = \frac{\sin 3\alpha}{\cos^3 3\alpha} d\alpha \quad \text{より}$$

$$\begin{aligned}
 I_j(x) &= -3 \int \frac{1}{2}t^2 dt t^{-3/2} \cos \alpha \\
 &= -3 \int \frac{\sin 3\alpha}{\cos^2 3\alpha} d\alpha \cos \alpha \\
 &= -\frac{3}{2} \int d\alpha \sin 2\alpha \frac{\cos 2\alpha + 1/2}{(\cos 2\alpha + 1)} (\cos 2\alpha - 1/2)^{-2}
 \end{aligned}$$

さらに、変数変換 $X = 2 \cos 2\alpha - 1$ を行う。 $\cos 2\alpha = (X + 1)/2$, $dX = -4 \sin 2\alpha d\alpha$ より

$$\begin{aligned} I_j(x) &= \frac{3}{2} \int dX \frac{(X+2)}{(X+3)X^2} \\ &= \frac{3}{2} \left\{ \frac{1}{9} \int dX \left(\frac{1}{X} - \frac{1}{X+3} \right) + \frac{2}{3} \int dX \frac{1}{X^2} \right\} \\ &= \frac{1}{6} \ln \left| \frac{X}{X+3} \right| - \frac{1}{X} \end{aligned}$$

以上より、(99) 式は次のように計算される。

$$I_j(x) = \frac{1}{6} \ln \left| \frac{X_j}{X_j+3} \right| - \frac{1}{X_j} \quad (100)$$

ここで $X_j \equiv 2 \cos 2\alpha_j - 1$, $\alpha_j \equiv \frac{1}{3} \text{Arctan} \sqrt{t^3 - 1} + \frac{2\pi}{3} j$ 。

本節の以下の部分では、減衰解 $\chi'_0 = -\kappa$ ($j=0$) の場合のみを考える。このとき

$$I_0(x) = \frac{1}{6} \ln \left| \frac{X_0}{X_0+3} \right| - \frac{1}{X_0}$$

ここで $X_0 \equiv 2 \cos 2\alpha_0 - 1$, $\alpha_0 \equiv \frac{1}{3} \text{Arctan} \sqrt{t^3 - 1}$ 。また、転回点 $x^{(q)}$ では、 $t=1, \alpha_0=1, X_0=1$ より $I_0(x^{(q)}) = -(1 + \ln 2^{1/3})$ 。故に、転回点からの定積分は次式のようにになる。

$$- \int_{x^{(q)}}^x dx' \kappa(x') = 1 + \ln 2^{1/3} + \ln \left(\frac{X_0}{X_0+3} \right)^{1/6} - \frac{1}{X_0} \quad (101)$$

従って、補正禁止領域での波動関数 (60) は次のようになる。

$$\Psi_{\text{II}} = \exp \left(- \int_{x^{(q)}}^x dx' \kappa(x') \right) = 2^{1/3} e \left(\frac{X_0}{X_0+3} \right)^{1/6} \exp \left(- \frac{1}{X_0} \right) \quad (102)$$

B.3 古典許容領域での漸近形

$|\xi|^{3/2} \gg 1$ のとき、 κ, k の積分形は次のような漸近形をもつ。

$$\int_{x^{(q)}}^x dx' \kappa(x') = - \left(\frac{4}{3} + \frac{2}{3} \ln 2 + \frac{1}{2} \ln(-\xi) + \frac{5\sqrt{3}}{9} (-\xi)^{-3/2} \right) + \mathcal{O}((- \xi)^{-3})$$

$$\int_{x^{(q)}}^x dx' k(x') = - \left(\frac{2}{3} (-\xi)^{3/2} + \frac{\pi}{4} - \frac{1}{16} (-\xi)^{-3/2} \right) + \mathcal{O}((- \xi)^{-3})$$

ここで、 $\mathcal{O}((- \xi)^{-3/2})$ を無視するとき、波動関数 (68), (60) の古典許容領域での漸近形は、それぞれ次のようになる。

$$\Psi_0^{\text{NL}}(x) \sim N \frac{(2e)^{4/3}}{2^{2/3}} \sqrt{-\xi} \quad (103)$$

$$\Psi_{\text{I}}(x) \sim \frac{2^{1/3}}{(2e)^{2/3}} (-\xi)^{1/4} \left[A_+ \exp \left(-i \left(\frac{2}{3} (-\xi)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right) \right) + A_- \exp \left(i \left(\frac{2}{3} (-\xi)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right) \right) \right] \quad (104)$$

B.4 古典禁止領域での漸近形

$\xi^{3/2} \gg 1$ のとき、 X_0 は次のような漸近形をもつ。

$$X_0 = \frac{2}{3}\xi^{3/2} + \frac{1}{6} - \frac{1}{16}\xi^{-3/2} + \mathcal{O}(\xi^{-3})$$

ここで、 $\mathcal{O}(\xi^{-3/2})$ を無視するとき、波動関数 (68), (60) の古典禁止領域での漸近形は、それぞれ次のようになる。

$$\Psi_0^{\text{NL}}(x) \sim N \frac{(2e)^{5/6}}{2^{2/3}} \xi^{-1/4} \exp\left(-\frac{2}{3}\xi^{3/2}\right) \quad (105)$$

$$\Psi_{\text{II}}(x) \sim \frac{(2e)^{5/6}}{2^{2/3}} \xi^{-1/4} \exp\left(-\frac{2}{3}\xi^{3/2}\right) \quad (106)$$

謝辞

本研究は、当初、非線形シュレディンガー方程式を解くことに端を発し、そこでのアイデアが半古典論の改良につながった。まず、非線形シュレディンガー方程式を解くというテーマとその重要性を示唆してくださった上田正仁教授 (東工大) に大変感謝致します。同教授は、指導教官として、時には厳しく、時には尋常ならざる熱意をもって議論の相手になってくれました。また、半古典論の改良をすすめていく上で、多くの有益な助言、アイデアを与えてくださり、自らも多くの計算をしてくださった足立聡助手 (東工大) に深く感謝致します。同助手は、時には長時間に亘って共に考えてくださり、研究をすすめていく上で重要なことを身をもって教えてくださりました。同時に、上田研究室 OB の木村敬氏 (NTT 物性基礎研)、斎藤弘樹氏 (東工大) に、この場をお借りして御礼を申し上げます。両氏には、ここでは語りつくせないほど、お世話になりました。なお、本論文は発行までに修士論文からいくつかの補筆をおこなった。補筆するに際して、重要な質問、助言を与えてくださった池田研介教授 (立命館)、倉辻比呂志教授 (立命館)、瀬戸亮平君 (立命館) に激しく感謝します。

今回、修士論文が「物性研究」に掲載されるに際して、さまざまな方々から、ご質問、ご指摘が得られることは、私にとって喜ばしいことである。遠慮なく、御一報くださりますようお願い致します。

参考文献

- [1] M. V. Berry and K. E. Mount, Rep. Prog. Phys. **35**, 315 (1972).
- [2] N. Fröman and P. O. Fröman, *JWKB Approximation* (North-Holland, Amsterdam, 1965).
- [3] W. H. Miller, Advan. Chem. Phys. **30**, 77 (1975) ; **25**, 69 (1974).
- [4] A. Voros, Ann. Inst. H. Poincaré. **39**, 211 (1983).
- [5] C. M. Bender and S. A. Orszag, *Advanced Mathematical methods for Scientists and Engineers* (McGraw-Hill, New York, 1978)
- [6] A. H. Nayfeh, *Perturbation methods* (Wiley, New York, 1973)
- [7] V. V. Goldman, I. F. Silvera and A. J. Leggett, Phys. Rev. B **24**, 2870 (1981).
- [8] G. Baym and C. J. Pethick, Phys. Rev. Lett. **76**, 6 (1996).
- [9] W. E. Milne, Phys. Rev. **35**, 863 (1930).
- [10] *Handbook of Mathematical Functions* edited by M. Abramowitz and I. A. Stegun (Dover, New York, 1969).
- [11] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics* (Pergamon Press, Oxford, 1965).
- [12] F. Dalfovo and S. Stringari, Phys. Rev. A **53**, 2477 (1996) ; F. Dalfovo, L. Pitaevskii, and S. Stringari, Phys. Rev. A **54**, 4213 (1996).