

京都大学数理解析研究所研究集会
複素WKB法の理論と物理学への応用

1991年5月

量子トンネリングと複素WKB法

並木 雅俊 *

§1 はじめに

量子論の特徴の一つに、古典的な粒子（古典力学で記述された粒子）が通過できないようなポテンシャルエネルギー障壁でも、量子的な粒子（波動性を兼ね備えた量子論で記述された粒子）ならすり抜けられることがあげられる。これをトンネル効果（あるいは量子トンネリング）という。量子トンネリングは、ガモフらによる α 崩壊の理論的説明、超伝導でのクーパー対のトンネリング、トンネルダイオード、それにトンネル電流を測定し物質表面の原子構造を調べることのできる走査型トンネル顕微鏡（STM）など多くの物理現象を説明するばかりか、すでに実用化されている。

しかしながら、奇妙なことに、この現象を解析的に説明するWKB法は未だ未熟のままである。ここでは、この手法の利点と問題点を述べながら、物理学への応用を考えていく。また、量子効果を古典的に考察するのに都合のよい方法として半古典論がある。これはWKB法と密接な関係をもっている。まず、歴史に触れながらこれらに馴染んでいただく。

§2 WKB法歴史概観

WKB法の名は、その名から想定できるように、この手法に関連した3人の名の頭文字に由来している。3人とは、G. Wentzel⁽¹⁾, H.A. Kramars⁽²⁾, それに L. Brillouin⁽³⁾である。この3人が互いに独立にポテンシャル障壁の透過の問題を解く際に用いている。3人とも論文発表したのは、1926年のほぼ同じ時期である。しかし量子論の問題を解くという動機とは異なるが、標準型二階線形常微分方程式

$$w'' + k^2 q(z, k) w = 0 \quad (1)$$

のパラメータ k が大きいとした場合の解を得るとする数学の問題に置き換えるならば、すでに、この手法は89年前(1837年)に G. Green⁽⁴⁾と J. Liouville⁽⁵⁾によって独立に導出されている。それに彼らもアイデアの出所として20年

* 高千穂商科大学一般教育：〒168 東京都杉並区大宮2-19-1

前(1817年)の F. Carlini⁽⁶⁾ の論文に跡をみることができる。Green と Liouville 以後でも、この手法を論じている研究者もいる。Maxwell の後を継いでキャベンディッシュ研究所の所長となった Lord Rayleigh⁽⁷⁾ がその 1 人である。Rayleigh は、若い頃より波動現象に対する興味が強く、あらゆる波動現象を説明しようと試みていた。このためもあり、彼はある波動方程式を解くに際して Green や Liouville の方法を用いている。論文は1912年に掲載されている。この手法の物理学への初めての応用である。このような古典的波動方程式の解法への応用は、H. Jeffreys⁽⁸⁾ (1924年) も行っている。彼はこの近似に対しても組織的に論じている。

これらの事情があるにも拘らず、WKB という名は物理学の世界に定着してしまった。当然、これに対してクレームがついた。Jeffreys⁽⁹⁾ がこの口火を切っている。彼は、Wentzel, Kramars それに Brillouin は、量子力学にこの手法を使っただけであって、彼らのオリジナルな手法ではないばかりか、この手法に対する数学的な議論をしたわけではないとこの命名に不満を述べている。事実、Jeffreys はこの手法を用いていた数篇の論文の謝辞の欄に、次のような主旨を述べている。「Wentzel, Kramars, それに Brillouin の論文に出てくる近似的な接続公式は、私が1924年の論文の中で初めて導出したものである。それに私自身この公式を導くに当たって、私に先んじて物理学への応用を試みた R. Gans⁽¹⁰⁾ (1915年) と Rayleigh (1912年) の論文が大変参考になった。」従って、彼は、この近似方法に名を付けるなら原点に立ち返って、Green 型の近似と呼ぶことを提唱していた。(1926年に3人がほぼ同時に量子力学での問題を解き、話題を呼びこの近似法に名をつけてもらったが、この当時、Jeffreys の論文が古典電磁気学に関していたこともあって見落とされていたことも彼の印象を悪くした原因の一つであると思うのは邪推だろうか。)

Jeffreys と同様な意見をもっていた研究者は少なくはなかった。例えば、1954年の V.A. Bailey⁽¹¹⁾ の論文には、「歴史的根拠を基に考察してみると、この手法を BKW または WKB (あるいは、この三つの文字を他の互換で) と呼ぶ慣習は、事実には照らし合わせてみると明らかに不公平でありよろしくない」と書かれている。また、Bailey 自身は LR 近似と呼ぶことを提唱した。しかしながら、F.W.J. Olver⁽¹²⁾ のように Liouville-Green 近似という名を使っている研究者もいるが、現在では、Jeffreys の意に反して、JWKB 法 (あるいは WKB J 法) と呼ばれることはあっても Liouville-Green 近似 (あるいは LG 近似) と呼ばれることは数学者の世界においてすら少数派になってきている。物理学者に Liouville-Green 近似 (あるいは LG 近似) と尋ねても返事を期待してはいけない。慣例とは恐ろしいものである。(なお、ウェールズの J. Heading⁽¹³⁾ が Phase-integral 法と呼んでいる手法は、複素 WKB 法のことである。彼は、WKB 法がこのような歴史を持っていることに気づかって新たに名前をつけたのであろう。)

このように WKB の歴史を眺めると Wentzel, Kramars, それに Brillouin

の論文が、話題は呼んだがオリジナルなものではなかったかと考えるのはよくない。量子力学の解釈に悩まされていた時代である。彼らの論文が重要視されたことは量子力学と古典力学を結ぶ理論（半古典論）となっていることからわかる。現在では、「量子論にWKB法を適応することを半古典論である」と認識されるほどに、これらは密接なものとなっている。これは Wentzel, Kramars, それに Brillouin の論文が残した財産でもある。

§3 半古典論

量子力学は、60年以上も前に大筋の関係をみたにもかかわらず、それを用いて自然界における様々な物理現象の解釈をする際に（古典力学のように）そのまま直感にうっにえて理解することが大変難しい体系である。このため現象をそのまま量子論によって解釈することは特殊な場合を除いてはほとんど不可能である。

そこで通常は量子論で取り扱う前に、物理現象を古典論で記述し、それを量子化するという手順をふんでいる。量子化の手法としては、最も広く使われている解析力学から発展させて考えることのできる正準量子化、Feynman によって提唱された径路積分量子化⁽¹⁴⁾、それに Parisi と Wu による確率量子化⁽¹⁵⁾などがある。これらはそれぞれの利点に合わせて理論の構築（あるいは再構築）に使用されている。径路積分量子化は、非摂動論的計算法として場の量子論の形式化の中心として、また最近では超ひも理論の形式化には書かせない手法となっている。また、ブラウン運動論のような形で量子論を定式化する確率量子化は、他の2つより歴史は浅く一般にあまり知られていないが他の2つでは拘束条件がホロノーム型に限られているが、確率量子化では非ホロノーム型でもよいといったこと、それに径路積分のような巨大な行列式の計算の必要はないなどの利点（ただし、逆行列の計算は必要）がある。

逆の立場もある。量子論で計算された物理現象を解釈する際に、量子論を特徴づけている定数 $\hbar$ をパラメータとして扱い、これをゼロに近づけて古典的な描像を得る場合がある。ここで $\hbar$ はプランク定数 h を 2π で割ったものである。これは量子論的には近似となるため半古典近似あるいは準古典近似と呼ばれている。半古典論は、このような動機によってつくられた理論である。このため半古典論は量子論とほぼ同じ歴史をもち、その文献の量も莫大である。⁽¹⁶⁾

準古典論と呼ばれる由来は、量子論に準じた近似理論とでも考えればよいのであるが、「半古典」の名の由来は量子論と古典論とを結ぶ理論で、立場としては（半分とは限らないが）間に位置していることにある。（ランダウ=リフシッツの教科書では準古典を用いている）異なった視点での理解ができるように、例をあげて説明する。

まず、原子どうしの衝突を例にとってみる。原子はレプトン（電子）とハドロン（核子）の複合系である。これは、水素原子を例にして考えてみても、

ド・ブローイ波長が2000倍近くも異なっている物質波の複合体であると考えられる。このため、衝突のエネルギーがさほど高くなければ、ハドロンの複合体である原子核の運動は古典的な粒子として、電子の運動は量子的な粒子として取り扱うことによって衝突などを表現できる。また第ゼロ近似として、原子核の運動は電子の運動に比べゆっくりとしているので、これら運動系の間のエネルギーの受渡しを無視して取り扱うことができる。原子衝突や分子物理学で断熱近似やボルン・オッペンハイマー近似がよく使われるのはこのためである。

もう一つ例をあげておく。量子宇宙論は、量子効果が時空（重力）に影響を及ぼす、宇宙の大きさが 10^{-33}cm あたりまでの初期宇宙を描き古典宇宙論の抱える問題（初期条件問題、特異点回避、密度ゆらぎなど）を解くことにある。しかし、現在のところ重力の量子化はできていない。このためビレンキンらは、半古典宇宙論（トンネル効果からの類推）より宇宙の境界条件を定め、これによりインフレーションを予言しており一応の成功をおさめている。半古典宇宙論は、未知の理論や現象を既知の量子効果と古典的重力理論より量子宇宙論を推論することにより得られている。これは明らかに、前の例とは立場が異なっている。

§4 WKB法概説

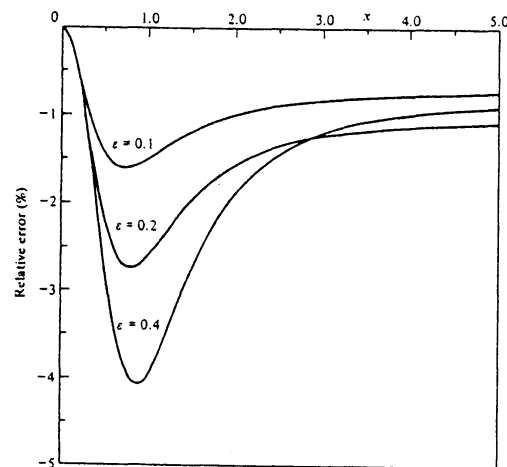


図1. WKB近似の相対誤差

方程式(1)のWKB解 w_1 と w_2 は、

$$w_1 = q^{-1/4} \exp\left(i k \int_{z_0}^z q^{1/2} dz\right)$$

$$w_2 = q^{-1/4} \exp\left(-i k \int_{z_0}^z q^{1/2} dz\right)$$
(2)

と示される。まず、 $q = -(1+x^2)$ とした時の計算例を図1に示す。境界条件は $w(0)=0$, $w'(0)=1$ である。ここで $x = \text{Re}(z)$, $\epsilon = 1/k$ で、この場合のWKB解は

$$w \sim \epsilon (1+x^2)^{-1/2} \sinh [(x+x^3/3)/\epsilon] \quad (3)$$

である。また、図の縦軸は相対誤差 $(= (\text{WKB解} - \text{厳密解}) / \text{厳密解})$ を示している。図から、パラメータ ϵ が多少大きくまた多少 x が小さくても十分に良い近似式となっていることがわかる。

上の例で良い近似となっている理由に、 x が実数の時では常に $q \neq 0$ であるためである。 $q=0$ となる点を転廻点 (turning point) あるいは遷移点 (transition point) という。転廻点では式(2)をみても明らかに、この近似は破綻する。より詳細に考察するため、WKB解を式(1)に代入してみると、

$$\begin{aligned} w''_{\text{WKB}} + k^2 q w_{\text{WKB}} &= \left[\frac{3}{4} \left(\frac{q'}{q} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{q''}{q} \right] w_{\text{WKB}} \\ &= \{q, z\} w_{\text{WKB}} \end{aligned} \quad (4)$$

となる。記号 $\{q, z\}$ はシュワルツの導関数を示す。これよりWKB解が有効であるには $\{q, z\} \ll 1$ が成り立たなければならない。これからも転廻点 $q=0$ が異常な点であることがわかる。このように転廻点近傍ではWKB解は使うことができなくなり、この近似において特別な点となる。注意しておくが、この転廻点は解くべき微分方程式にとっては特異点でもなければ、またその他の何ら特別な点ではない。このため、微分方程式をこの点の近傍で解くことは原理的には何の困難もないはずである。問題は、WKB法としてはこの転廻点を含んだ近傍領域ではこの近似が破綻してしまうことにある。転廻点を仮りに x_0 とする。点 x_0 の左側で求められたWKB解から点 x_0 の右側でのWKB解を求めることを接続問題という。これは易しい問題ではない。まず、点 x_0 の近傍では近似が破綻するため、これらの解の接続を実軸上でおこなうことができない。この難点は、複素平面上で転廻点 x_0 を中心とした十分に大きな円弧を描いた径路をとることによって回避できるかのように思われるが、ストークス曲線と呼ばれる解の解析的延長が破綻する線を過ぎらなくてはならないために単純には解決できない。このように接続問題は、転廻点から生じているため転廻点問題ともいわれている。

まず、転廻点が1つだけ存在する場合を例にしてこの困難を解説する。それには、エアリーの微分方程式が都合がよい。これは、方程式(1)で $q(z, k) = -z$ かつ $k=1$ とした方程式である。すなわち、

$$\frac{d^2 \omega}{dz^2} - z \omega = 0, \quad (5)$$

である。また、この解の1つは $Ai(z)$ と記され、その漸近解は、

$$Ai(z) \sim \frac{1}{2} \pi^{-1/2} z^{-1/4} \exp\left(-\frac{2}{3} z^{3/2}\right) \quad (|\arg z| < \frac{2}{3} \pi) \quad (6)$$

$$Ai(-z) \sim \pi^{-1/2} z^{-1/4} \sin\left(\frac{2}{3} z^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) \quad (|\arg z| < \pi) \quad (7)$$

である。転廻点 $z=0$ 近傍では、これら漸近解は成り立たないことを注意しなくてはならない。WKB近似では転廻点は非常に重要な点である。

詳細を論じる前に、ストークス曲線と反ストークス曲線を定義しておく。方程式(1)のWKB解は、

$$\omega_{1,2} = q^{-1/4} \exp[\pm i \xi(z)], \quad (8)$$

$$\xi(z) = k \int_a^z q^{-1/2} dz \quad (9)$$

である。ここで積分の下限 a は通常では転廻点 $q(a, k)=0$ をとる。また、解(8)を見ると明らかに複素平面 z 上で、

$$\text{反ストークス曲線:} \quad \text{Im}\{\xi(z)\}=0 \quad (10)$$

となるとき解は振動型となる。この条件を満たす曲線を反ストークス曲線(anti-Stokes curves)という。また、

$$\text{ストークス曲線:} \quad \text{Re}\{\xi(z)\}=0 \quad (11)$$

を満たす曲線上では、解は振動せずに指数関数的な増大か減少の形をとる。この曲線をストークス曲線(Stokes curves)という。

さてこの場合の反ストークス曲線は、 $\text{Im} \xi(z) = (2/3) \text{Re} z^{3/2} = 0$ を満たすので、 $z = \rho \exp(i\theta)$ と置くと $\theta = \pi, \pm \pi/3$ であるから図2の実線となる。またストークス曲線は、 $\text{Re} \xi(z) = -(2/3) \text{Im} z^{3/2} = 0$ であるから $\theta = 0, \pm 2\pi/3$ となる。これは図2の破線で示した。図中の波線は分岐切線である。転廻点を中心とした複素 z 平面内の径路を辿るとWKB解の表現が変化することを示そう。

まず説明が簡潔になるように、次の記号を定めておく。

$$(a, z) \equiv q^{-1/4} \exp\left[i k \int_a^z q^{-1/2} dz\right] \quad (12)$$

それに,

$$(z, a) \equiv q^{-1/4} \exp[-ik \int_a^z q^{-1/2} dz] \quad (13)$$

である。これらの積分の径路($a \rightarrow z$)は分岐切線とは交差をしないことが条件となっている。また、これらはWKB解(6)の ω_1 と ω_2 に等しい。解 (a, z) が複素 z 平面内のある定まった領域で指数関数的に支配的であるならば、これを $(a, z)_d$ と記してドミナント (dominant) な解と呼ぶ。この領域では解 (z, a) はサブドミナント (subdominant) な解となるので $(z, a)_s$ と記すことにする。また、指数関数項のみのものも定めておく。

$$[a, z] \equiv \exp[i \frac{1}{\epsilon} \int_a^z q^{-1/2} dz] \quad (14)$$

この記号は、 $(a, z) = [a, b](b, z)$ 等のような径路表示に便利である。また、 $(a, z)(z, a) = q^{-1/2}$ あるいは $[a, b][b, a] = 1$ という関係式が成り立つことが分る。

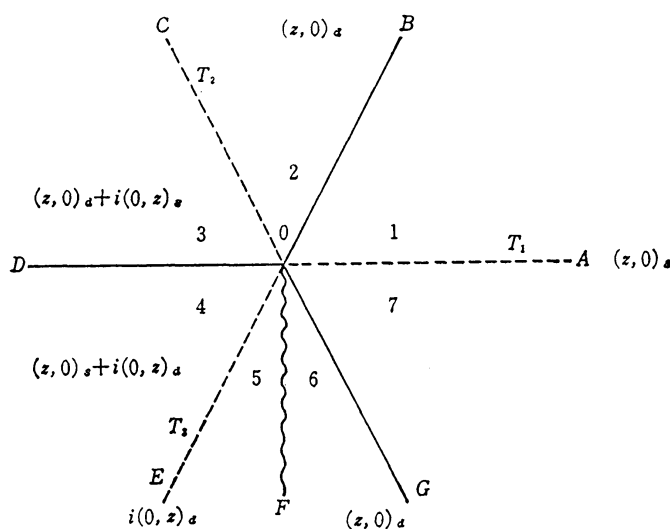


図2. $q(z) = -z$ の場合のストークス曲線と反ストークス曲線

さて、この記号を用いると $q = -z$ の場合のWKB解は、

$$(0, z) = z^{-1/4} \exp[\frac{2}{3} z^{3/2}], \quad (z, 0) = z^{-1/4} \exp[-\frac{2}{3} z^{3/2}] \quad (15)$$

と記すことができる。また、この場合の反ストークス曲線あるいはストークス曲線は図2のようにになっている。

ここで正の実軸上で成り立つ漸近解が負の実軸上ではどのように変化をするかを考えてみる。この際、分岐切線、反ストークス曲線、それにストークス曲

線を横切るのでWKB解の一価性の条件と一意性の条件を基に導かれた「ファリー(Furry)の規則」が必要になる。

ファリーの規則

(I)分岐切線を正の方向に横切る時,

$$(0, z) \rightarrow -i(z, 0)$$

$$(z, 0) \rightarrow -i(0, z)$$

とする。負の方向では、ここでの $(-i)$ は $(+i)$ とする。

(II)反ストークス曲線を横切る時,

$$(0, z)_s \rightarrow (0, z)_d$$

$$(z, 0)_d \rightarrow (z, 0)_s$$

$$(z, 0)_s \rightarrow (z, 0)_d$$

$$(0, z)_d \rightarrow (0, z)_s$$

のようにドミナントとサブドミナントが交換する。

(III)ストークスを横切る時では,

(新しいサブドミナント係数)

$$= (\text{前のサブドミナント係数}) \pm T \times (\text{ドミナント係数})$$

のように解の係数変化が起こる。ここで、 T はストークス乗数(Stokes constant or Stokes multiplier)である。 $q = -z$ の場合では $T = i$ である。また、正 $(+)$ 符号は正の方向で横切る時で、負 $(-)$ 記号は負の方向で横切る時の記号である。

この規則の例として、解 $(z, 0)$ の係数変化を複素 z 平面内で転廻点を左に見ながら(正の方向に)回転する径路に沿った場合に適用してみる。図2を参考にする。これは、実正軸(ストークス曲線)上にWKB解 $(z, 0)_s$ が成り立っている場合である。ストークス曲線上ではドミナントとサブドミナントが最もはっきりしている。この解から出発して順次にファリーの規則を適応してみる。領域1と7では、 $\omega = (z, 0)_s$ が成り立つ。領域2に渡るには反ストークス曲線を横切るので $\omega = (z, 0)_d$ となる。領域3に渡るにはストークス曲線を横切るので新しくサブドミナントの項が付け加わり、 $\omega = (z, 0)_d + i(0, z)_s$ となる。これで実負軸上での解 $\omega = (z, 0) + i(0, z)$ を得ることができた。逆回りで行なってみる。領域7では $\omega = (z, 0)_s$ 、領域6では $\omega = (z, 0)_d$ 、領域5に渡るには分岐切線を時計回りに横切るので $\omega = i(0, z)_d$ 、領域4では $\omega = i(0, z)_d + i \times (-i)(z, 0)_s = (z, 0)_s + i(0, z)_d$ となるので、ドミナントもサブドミナントもないニュートラルな解を持つ反ストークス曲線である実負軸上では $\omega = (z, 0) + i(0, z)$ となり正の方向で求めた解と一致することが分る。

すなわち実正軸上の解、 $\omega = (z, 0)_s$ を实負軸上に接続すると解は、

$\omega = (z, 0) + i(0, z)$ となることが分った。この例は、エアリーの場合と等価である。係数を合わせるによりエアリー解の実正軸上の漸近解は、

$$\text{Ai}(z) = \frac{1}{2} \pi^{-1/2} (z, 0)_s = \frac{1}{2} \pi^{-1/2} z^{-1/4} \exp\left[-\frac{2}{3} z^{3/2}\right] \quad (16)$$

となり、上の例に従い実負軸上での解は、

$$\text{Ai}(z) = \frac{1}{2} \pi^{-1/2} (z, 0) + \frac{i}{2} \pi^{-1/2} (0, z) \quad (17)$$

となる。ここで、式(16)の z に x を式(17)の z に $x \exp(i\pi)$ を代入すると、

$$\begin{aligned} \text{Ai}(-x) &= \frac{1}{2\pi^{1/2}} \{x \exp(i\pi)\}^{-1/4} \left[\exp\left\{-\frac{2}{3}(x \exp(i\pi))^{3/2}\right\} \right. \\ &\quad \left. + i \exp\left\{\frac{2}{3}(x \exp(i\pi))^{3/2}\right\} \right] \\ &= \pi^{1/2} x^{-1/4} \sin\left(\frac{2}{3} x^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) \end{aligned} \quad (18)$$

となる。これはエアリー関数 $\text{Ai}(z)$ の漸近式(6), (7)に一致する。

転廻点が1つの場合の例から解の接続を考えておく。例題は、 $q(z, \varepsilon) = -\sinh x (\cosh x)^2$ とする。転廻点は $x=0$ である。最初に、領域を3つに分けて考えてみる。 $x \gg 1$ を領域 i, $|x| \ll 1$ を領域 ii, そして $x \ll -1$ を領域 iii とする。領域 i と iii は転廻点から離れるため通常の WKB 解となり、領域 ii はエアリー方程式の解になることが予想される。すなわち、

$$\begin{aligned} w_i &= C q^{-1/4} \exp\left(-k \int_0^x [-q]^{1/2} dx\right) & x \gg k^{-2/3} \\ w_{ii} &= C 2\pi^{1/2} k^{1/6} \text{Ai}(k^{2/3} x) & |x| \ll 1 \end{aligned} \quad (19)$$

$$w_{iii} = C q^{-1/4} \sin\left(k \int_x^0 [-q]^{1/2} dx + \frac{\pi}{4}\right) \quad (-x) \gg k^{-2/3}$$

と表現できる。ここで極限は $1/k \rightarrow 0_+$ である。定数 C は境界条件より求められる。例えば $w(0) = 1$, $w(\infty) = 0$ であれば $\text{Ai}(0) = 3^{-2/3}/\Gamma(2/3)$ であるから、 $C = (1/2) k^{-1/6} \Gamma(2/3) 3^{2/3} \pi^{-1/2}$ である。これら3つの式から負の x で生じた波が、原点で反射し、正の方向へ吸収されていくようすがわかる。これら3つの式を一つの式で表現するに、一様漸近近似 (Uniform Asymptotic Approximation) である。この一様漸近近似を用いると式(19)は、

$$w_{\text{unif}} = C 2\pi^{1/2} (3S_0 k/2)^{1/6} q^{-1/4} \text{Ai}((3S_0 k/2)^{2/3}) \quad (20)$$

となる。ここで

$$S_0 = \int_0^x [-q]^{1/2} dx$$

である。一様近似であるから、もちろん、この近似はすべての x で使える。この計算を図3に示す。図には厳密数値解と一様漸近近似解(20)が示してある。計算は、 $\epsilon = 1/k$ として $\epsilon = 0.2$, $\epsilon = 0.3$, $\epsilon = 0.5$, それに $\epsilon = 1$ で行った。

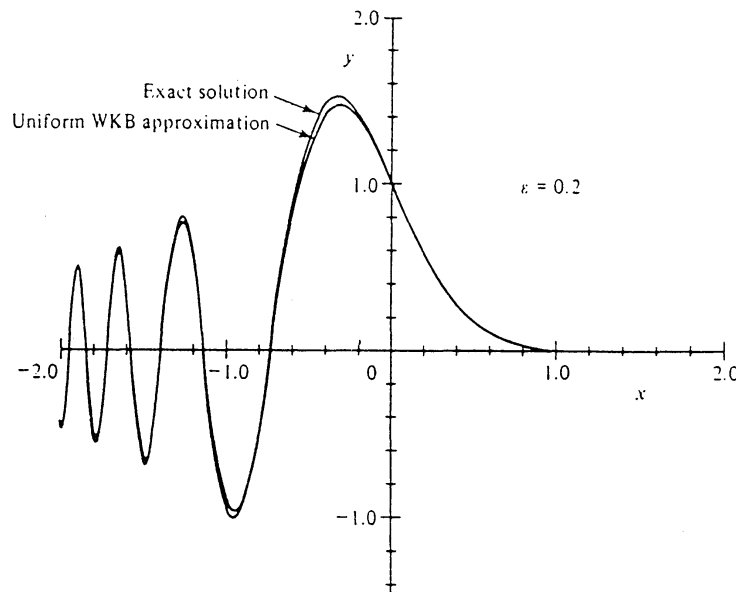


図3 a ($\epsilon = 0.2$ の場合)

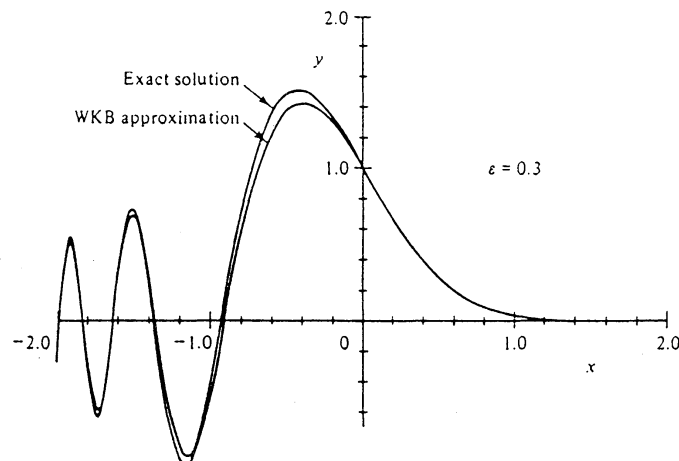
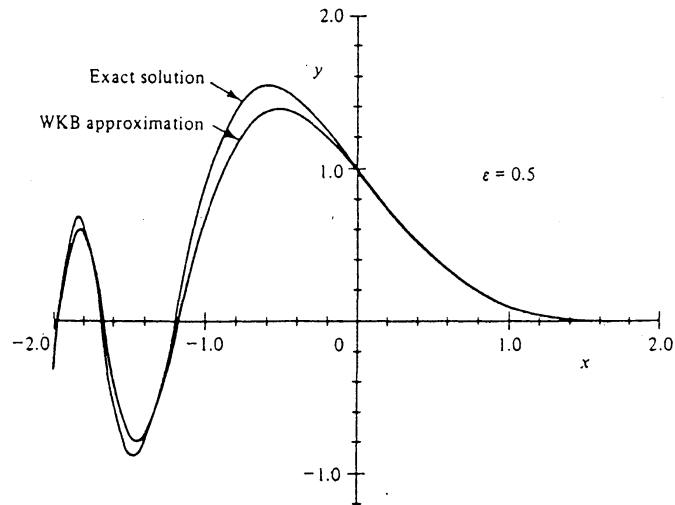
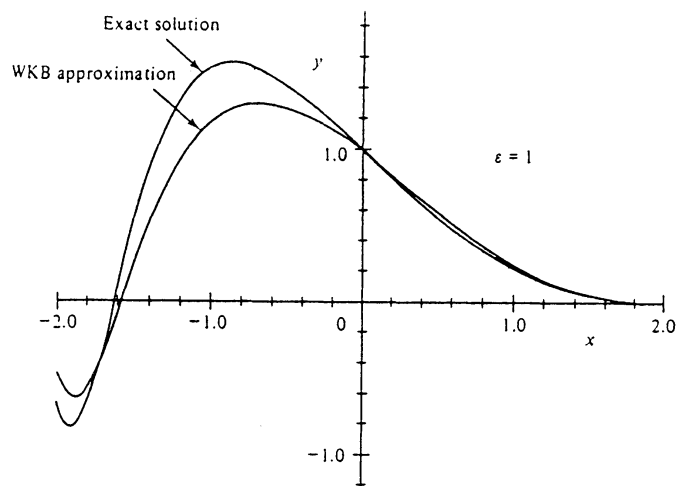


図3 b ($\epsilon = 0.3$ の場合)

図3 c ($\epsilon = 0.5$ の場合)図3 d ($\epsilon = 1$ の場合)

この計算例からわかるように多少 ϵ が大きくても近似がよいことがわかる。

さて物理への応用を考えるのなら、少なくとも転廻点が2つの場合を考えて置かなくてはならない。この場合、基礎となる方程式にウエバー(Weber)の微分方程式がある。これは $q(z, k) = z^2/4 + a$ という形である。これでエアリーの場合と同様(ただし、ストークス乗数が異なるので注意)に行えば漸近解および接続行列が求められる。(この詳細は省略する。) 原子核の α 崩壊や宇宙の創生などの説明に用いられているトンネル効果、それに原子・分子の動的過程やニュートリノ振動のMSW効果などでの断熱ポテンシャル間の遷移の計算をするために接続行列を使うと簡単である。これらの接続行列は、Miller-Goodの比較方程式法⁽¹⁷⁾を用いることによって求められる。ただし、この比較方程式法を用いるには、ストークス乗数などが求まっているなど漸近解がよくわかっている方程式を基にしなくてはならない。現在、このような方程式

は、転廻点が1つでその位数(z の次数)も1であるエアリーの微分方程式, 転廻点が2つでその位数が1であるウエバーの微分方程式, それに転廻点が1つであるがその位数は任意($q = z^n$)であるベッセル(Bessel)の微分方程式のみである。これら接続行列を物理への応用を意識しながら記す。

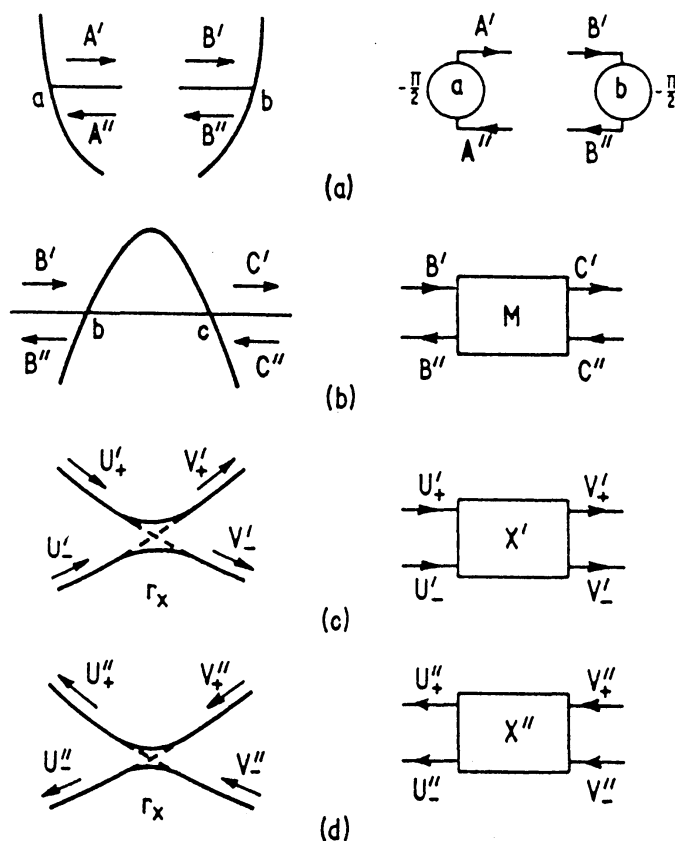


図4. 接続行列ダイアグラム. (a)転廻点, (b)ポテンシャル障壁の透過, (c)ポテンシャル交差(正の運動量) (d)ポテンシャル交差(負の運動量)

まず, 図4 aのような右ないし左からやってきた粒子(波)が転廻点で跳ね返される場合の振幅は次の接続行列から得られる。

転廻点が左側にある場合では,

$$\begin{pmatrix} A' \\ A'' \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} \exp(-i\pi/4) \\ \exp(-i\pi/4) \end{pmatrix} \quad (21a)$$

となる。また, 転廻点が右側にある場合では,

$$\begin{pmatrix} A' \\ A'' \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} \exp(-i\pi/4) \\ \exp(-i\pi/4) \end{pmatrix} \quad (21b)$$

となる。次に、図4 bのようなポテンシャル障壁の場合では、ポテンシャルが2次関数で表すことができるためウエバー方程式にそのまま帰着できる。例えば、左から入射してきた波の振幅が右側に透過する行列は、

$$\begin{pmatrix} C' \\ C'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (1 + \kappa^2)^{1/2} \exp(-i\phi), & i\kappa \exp(i\theta) \\ i\kappa \exp(-i\theta) & , (1 + \kappa^2)^{1/2} \exp(-i\phi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B' \\ B'' \end{pmatrix} \quad (22)$$

により求められる。また、シュレーディンガー方程式と比較することにより $k^2 q = 2\mu [E - V(r)]/\hbar^2 \equiv p(r)^2$ となるので、

$$\kappa = \exp(-\pi \delta),$$

$$\pi \delta = - \int_b^c |p(r)| dq \quad E < V_{\max},$$

$$= -i \int_{r_+}^{r_-} p(r) dq \quad E > V_{\max},$$

$$\theta = 0 \quad E < V_{\max},$$

$$= \int_{r_+}^{r_{\max}} p(r) dq + \int_{r_-}^{r_{\max}} p(r) dq \quad E > V_{\max},$$

$$\phi = \arg \Gamma(i\delta + 1/2) - \delta \ln |\delta| + \delta$$

と記すことができる。Eは善エネルギー、V(r)はポテンシャルエネルギーである。

ポテンシャル曲線の交差では、次のようなポテンシャルを定めておくとう便利である。

$$2V_{\pm}(r) = (V_1(r) + V_2(r)) \pm [(V_1(r) - V_2(r))^2 + 4V_{12}(r)]^{1/2}$$

また、これに対応する運動量も

$$p_{\pm}(r) = [2\mu (E - V(r))]^{1/2}/\hbar^2$$

としておく。これより図4 c, dに対応する接続行列は、

$$\begin{pmatrix} V_+' \\ V_-' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (1 - \lambda^2)^{1/2} \exp(-i\phi_s), & \lambda \\ -\lambda & , (1 - \lambda^2)^{1/2} \exp(i\phi_s) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_+' \\ U_-' \end{pmatrix} \quad (23)$$

と書ける。ここで、

$$\lambda = \exp(-\pi \nu)$$

$$2\pi\nu = \text{Im}\left\{\int_{r_+}^{r_-} [p_-(r) - p_+(r)] dr\right\}$$

$$\phi_s = \nu \ln(\nu) - \nu - \arg\Gamma(i\nu) + \pi/4$$

である。

2つのポテンシャル交差問題の研究は、原子・分子の動的過程を取り扱う原子衝突でさかんに行なわれた。1932年の Landau, Zener, Stueckelberg⁽¹⁸⁾などの先駆的な研究に始まり、多くの発展が見られる。一般に、原子どうしの衝突による遷移機構は多くの準位が関与する。このため一般多準位問題への拡張が試みられた。まず、これら2つの状態の遷移確率を求める行列はファインマンの径路積分法と合わせて用いることにより2つの状態間の遷移確率を求めるばかりか多くの状態が関与した遷移過程も解析することができることが示されている。⁽¹⁹⁾しかし、これらは各々の2状態間の遷移が局在化している場合に限られる。遷移領域が重なっている場合、あるいは3つの状態が同時に交差している場合などでは適応できない。これらでは高階微分方程式のWKB法を確立しなくてはならない。(非断熱トンネル過程に関しては中村氏の報告を参考にしたい。)

§5 問題点

前節のように転廻点が1つ、あるいは2つ存在する場合での解の接続はストークス現象を考慮することにより行なうことができた。これまでエアリーの微分方程式やウエバーの微分方程式を考察の基盤としたが、半古典論への応用を考えると、 $q = a_0 + a_1 z + a_2 z^2 + a_3 z^3 + \cdots = \sum a_i z^i$ と一般多項式である場合でのストークス現象の考察が是非とも必要である。この場合の一般的な考察は未だに未解決であるが、遷移点どうしが離れているといった特殊な条件を付け加えるとすでに Fedoryuk等⁽²⁰⁾や Sibuya⁽²¹⁾等によって体系づけられている。しかしながら、応用するには基礎となる条件が多くまた複雑であったり、議論が数学寄向けであることより物理学への応用は見られていない。そのため、現在、半古典論が用いている手法はより単純で簡潔な考察が成されているウエバーの微分方程式($q = (z^2 - a^2)$ である場合)、それにベッセルの微分方程式($q = z^n$ となる位数の高い場合)を基盤にできるものに限られている。実際、物理学への応用、特に半古典論ではこれらのものに Miller-Good の比較方程式法を適用したものが中心となっている。

WKB法は、複素数で扱うことにより大きな欠点(転廻点問題の回避など)を解決してきたが、まだまだ問題は山積みである。(複素WKB法では、これらの近似解が複素 z 平面内の最初に制限された領域の範囲を越えてどの程度辿れるかも考える。)まず、2階常微分方程式に話を限っても3つ以上の転廻点

が強く兼ねあっている場合では近似は破綻する。これは物理現象を解析する場合、その範囲を大きく狭める。しかし、物理学研究者にとって、WKB法は非常に直感にうったえ易い関数形を与えてくれる。これは何よりものプレゼントである。この魅力のため、たとえ転廻点が多くある場合、あるいは高階微分方程式⁽²²⁾や偏微分方程式への拡張が難しくても、その開発に執着せざるを得ない。

(追記) ここではストークス曲線の定義を Heading に従って式(11)としたが、数学者 Fedoryuk によると式(10)がストークス曲線と定められている。すなわち、Heading と Fedoryuk ではストークス曲線と反ストークス曲線の定義が逆なのである。このため、ストークス現象の定義も異なっている。これはWKB法を学ぶ者を混乱させるばかりか異なった分野の研究者どうしの交流の妨げとなる。言葉(とその定義)の統一が確実に必要である。

文献:

- (1) G. Wentzel, Zeit. f. Physik, 38(1926)518
- (2) H.A. Kramers, Zeit. f. Physik, 39(1926)828
- (3) L. Brillouin, Comptes Rendus, 183(1926)24
- (4) J. Liouville, J. Math. Pures Appl., 2(1837)16
- (5) G. Green, Trans. Camb. Ohil. Soc., 6(1837)457
- (6) F. Carlini, 「Ricerche sulla convergenza della serie che serve alla soluzione del problema di Keplero」 (Milan, 1817)
- (7) J.W.S. Rayleigh, Proc. Roy. Soc. A86(1912)207
- (8) H. Jeffreys, Proc. Lond. Math. Soc. 23(1924)428
- (9) H. Jeffreys, Proc. Cambridge Philos. Soc. 49(1953)601
- (10) R. Gans, Ann. Phys. Lpz., 47(1915)709
- (11) V.A. Bailey, Phys. Rev. 96(1954)865
- (12) F.W.J. Olver, 「Int. to Asymptotics & Special Func.」, Academic Press 1974
- (13) J. Heading, 「An Introduction to Phase-Integral Methods」, Methuen & Co Ltd. 1962
- (14) R. Feynman and P. Hibbs, 「Quantum Mechanics and Path Integrals」, McGraw Hill, 1965, [北原和夫訳: ファインマン経路積分と量子力学 (マグロウヒル, 1990)]
- 崎田文二, 吉川圭二, 「経路積分による多自由度の量子力学」, 岩波書店, 1986
- 福田礼次郎, 「マクロ系の量子力学」, 丸善, 1991
- (15) G.Parisi and Wu Yongshi, Sci Sin., 24(1981)483

- J.R. Klauder, *Acta Physica Austriaca*(Springer), Suppl. 35(1983)251
- (16) 次の文献(あるいはその文献リスト)を参考にするとよい。
- M. Froman and P.O. Froman, 「JWKB-approximation」,
North-Holland, Amsterdam, 1965
- K.W. Ford and J.A. Wheeler, *Ann. Phys.*, NY 7(1959)239 : ibd.p.259
- V.P. Maslov and M.V. Fedoriuk, 「Semi-classical approximation in quantum mechanics」, D.Reidel, 1981
- M.S.Child(ed.), 「Semiclassical methods in Molecular Scattering and Spectroscopy」, D.Reidel, 1980
- (17) S.C. Miller and R.H. Good, *Phys. Rev.* 91(1953)174
- M.V. Berry and K.E. Mount, *Rep. Prog. Phys.* 35(1972)315
- (18) L.D. Landau, *Phys. Z. Sowjetunion*, 1(1932)88; ibid. 2(1932)46
- C. Zener, *Proc. Roy. Soc.* A137(1932)696
- E.C.G. Stueckelberg, *Helv. Phys. Acta.* 5(1932)369
- E.E. Nikitin and S.Y.Umanskii, 「Theory of Slow Atomic Collisions」,
Springer-Verlag, Berlin, 1984
- (19) W.H. Miller and T.F. George, *J. Chem. Phys.* 56(1972)5637
- W.H. Miller, *Advan. Chem. Phys.* 25(1974)69
- (20) M.A. Evgrafov and M.B. Fedoryuk, *Uspehi Mat. Nauk.*, 21(1966)3
- (21) Y. Sibuya, 「Global Theory of a 2nd Order Linear Ordinary
Differential Equation with a Polynomial Coefficient」,
North-Holland, 1975
- F.W. Olver, 「Asymptotics and Special Functions」,
Academic Press, 1974
- (22) M. Nakano, M. Namiki and H.Nishimoto, *Kodai Math. J.* 14(1991)