第26章　準古典的近似（WKB近似）

量子力学を特徴付けるのはプランク定数 $\hbar$ である。$\hbar \to 0$ の極限において，量子力学の法則は古典力学の法則に帰着しなければならず，この対応原理は量子力学を構築する際に極めて重要な役割を果たした。従って，量子力学において，プランク定数についてべき級数展開すると，第１近似として古典力学が導かれ，高次の補正項も系統的に求めることができる。この準古典的近似法を，**ウェンツェル-クラマース-ブリユアン近似**（Wentzel-Kramers-Brillouin approximation），あるいは，３人の名前の頭文字をとって **WKB 近似** という。ここでは，WKB 近似を用いて導出されるボーア-ゾンマーフェルト（Bohr-Sommerfeld）の量子化条件についても述べる。

26.1　シュレディンガー方程式の古典的極限

26.1.1　古典近似の定式化

ポテンシャル $V(\boldsymbol{x},t)$ のもとで運動する質量 m の粒子に対するシュレディンガー方程式は

$$i\hbar\,\frac{\partial\psi(\boldsymbol{x},t)}{\partial t} \;=\; H\,\psi(\boldsymbol{x},t) \;=\; -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{x},t)+V(\boldsymbol{x},t)\psi(\boldsymbol{x},t) \tag{26.1}$$

で与えられる。波動関数 $\psi(\boldsymbol{x},t)$ は複素関数であるので，２つの実関数 $A(\boldsymbol{x},t)$ と $S(\boldsymbol{x},t)$ を用いて

$$\psi(\boldsymbol{x},t) \;=\; A(\boldsymbol{x},t)\exp\Big(\frac{i}{\hbar}\,S(\boldsymbol{x},t)\Big) \tag{26.2}$$

と表すことができる。これをシュレディンガー方程式 (26.1) に代入すると，右辺の空間座標についての２階微分は

$$\begin{aligned}
\nabla^2\psi \;&=\; \boldsymbol{\nabla}\cdot\Big[\exp\Big(\frac{i}{\hbar}\,S\Big)\,\boldsymbol{\nabla}A + A\exp\Big(\frac{i}{\hbar}\,S\Big)\,\Big(\frac{i}{\hbar}\,\boldsymbol{\nabla}S\Big)\Big] \\
&=\; \exp\Big(\frac{i}{\hbar}\,S\Big)\,\Big(\frac{i}{\hbar}\,\boldsymbol{\nabla}S\Big)\cdot\boldsymbol{\nabla}A + \exp\Big(\frac{i}{\hbar}\,S\Big)\,\nabla^2 A \\
&\quad\; + \boldsymbol{\nabla}A\cdot\exp\Big(\frac{i}{\hbar}\,S\Big)\,\Big(\frac{i}{\hbar}\,\boldsymbol{\nabla}S\Big) + A\exp\Big(\frac{i}{\hbar}\,S\Big)\,\Big(\frac{i}{\hbar}\,\boldsymbol{\nabla}S\Big)\cdot\Big(\frac{i}{\hbar}\,\boldsymbol{\nabla}S\Big) \\
&\quad\; + A\exp\Big(\frac{i}{\hbar}\,S\Big)\,\Big(\frac{i}{\hbar}\,\nabla^2 S\Big) \\
&=\; A\exp\Big(\frac{i}{\hbar}\,S\Big)\left[\frac{2i}{\hbar}\boldsymbol{\nabla}S\cdot\frac{\boldsymbol{\nabla}A}{A} + \frac{\nabla^2 A}{A} - \frac{1}{\hbar^2}(\boldsymbol{\nabla}S)^2 + \frac{i}{\hbar}\nabla^2 S\right],
\end{aligned}$$

左辺の時間についての微分は

$$\begin{aligned} i\hbar\,\frac{\partial\psi}{\partial t} &= i\hbar\left[\exp\!\Big(\frac{i}{\hbar}\,S\Big)\,\frac{\partial A}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}\,A\exp\!\Big(\frac{i}{\hbar}\,S\Big)\,\frac{\partial S}{\partial t}\right] \\ &= A\exp\!\Big(\frac{i}{\hbar}\,S\Big)\left[i\hbar\,\frac{1}{A}\,\frac{\partial A}{\partial t}-\frac{\partial S}{\partial t}\right] \end{aligned}$$

となる。どちらも $\psi = A\exp(iS/\hbar)$ がくくり出されるので，代入した後，両辺を ψ で割り，

$$-\left[\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{(\boldsymbol{\nabla}S)^2}{2m}+V-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\nabla^2 A}{A}\right]+\frac{i\hbar}{mA}\left[m\,\frac{\partial A}{\partial t}+\boldsymbol{\nabla}A\cdot\boldsymbol{\nabla}S+\frac{1}{2}\,A\,\nabla^2 S\right] \;=\; 0 \tag{26.3}$$

が得られる。左辺の実部と虚部は，それぞれ，0 である：

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{(\boldsymbol{\nabla}S)^2}{2m}+V \;=\; \frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\nabla^2 A}{A}, \tag{26.4}$$

$$m\,\frac{\partial A}{\partial t}+\boldsymbol{\nabla}A\cdot\boldsymbol{\nabla}S+\frac{1}{2}\,A\,\nabla^2 S \;=\; 0. \tag{26.5}$$

これら一組の方程式は，複素関数である波動関数を 2 つの実関数で表して，シュレディンガー方程式に代入して得られたものであり，元のシュレディンガー方程式 (26.1) と等価である。シュレディンガー方程式の古典近似は，実部の方程式 (26.4) においてプランク定数 $\hbar$ を 0 にしたものである：

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{(\boldsymbol{\nabla}S)^2}{2m}+V \;=\; 0. \tag{26.6}$$

26.1.2　古典的極限における古典粒子の流体

　波動関数 $\psi(\boldsymbol{x},t)$ を (26.2) のように 2 つの実関数で表したとき，粒子の確率密度 $\rho(\boldsymbol{x},t)$ は

$$\rho(\boldsymbol{x},t) \;=\; |\psi(\boldsymbol{x},t)|^2 \;=\; A(\boldsymbol{x},t)^2 \tag{26.7}$$

であり，確率の流れ $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{x},t)$ は

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{x},t) \;=\; \frac{\hbar}{i}\,\frac{1}{2m}\Big(\psi^*(\boldsymbol{\nabla}\psi)-(\boldsymbol{\nabla}\psi^*)\psi\Big) \;=\; A(\boldsymbol{x},t)^2\,\frac{\boldsymbol{\nabla}S(\boldsymbol{x},t)}{m} \tag{26.8}$$

となる。一方，(26.3) の虚部から得られた式 (26.5) の両辺に $2A/m$ をかけると，

$$2A\,\frac{\partial A}{\partial t} \;=\; \frac{\partial}{\partial t}A^2, \qquad \boldsymbol{\nabla}\cdot\left(A^2\,\frac{\boldsymbol{\nabla}S}{m}\right) \;=\; \frac{2A}{m}\,\boldsymbol{\nabla}A\cdot\boldsymbol{\nabla}S+\frac{A^2}{m}\,\nabla^2 S$$

より，

$$\frac{\partial}{\partial t}A^2+\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(A^2\,\frac{\boldsymbol{\nabla}S}{m}\right) \;=\; \frac{\partial\rho}{\partial t}+\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{j} \;=\; 0 \tag{26.9}$$

が得られる。すなわち，(26.5) は連続の方程式 $\partial\rho/\partial t+\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{j} \;=\; 0$ に他ならない。古典近似は，ポテンシャル V の中を互いに相互作用しないで運動する質量 m の古典的粒子の流体であると考えることができる。空間のある点における流体の密度と流れは，各時刻において，量子力学で表される確率密度 $\rho(\boldsymbol{x},t)$ と確率の流れ $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{x},t)$ に等しい。

連続の方程式を満たす流体では，速度の場は $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{j}/\rho$ で与えられ，今の場合は (26.7) と (26.8) から

$$\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x}, t) \;=\; \frac{\boldsymbol{j}(\boldsymbol{x}, t)}{\rho(\boldsymbol{x}, t)} \;=\; \frac{\boldsymbol{\nabla} S(\boldsymbol{x}, t)}{m} \tag{26.10}$$

と表せる。よって，シュレディンガー方程式の古典近似の式 (26.6) は

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2} m \boldsymbol{v}^2 + V \;=\; 0 \tag{26.11}$$

となる。この式の左辺は 0 であるから，その勾配も 0 である：

$$\boldsymbol{\nabla} \left[\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2} m \boldsymbol{v}^2 + V \right] \;=\; 0. \tag{26.12}$$

第１項と第２項は，それぞれ，

$$\boldsymbol{\nabla} \frac{\partial S}{\partial t} \;=\; \frac{\partial}{\partial t}(\boldsymbol{\nabla} S) \;=\; \frac{\partial}{\partial t}(m\boldsymbol{v}), \qquad \boldsymbol{\nabla}\left(\frac{1}{2} m \boldsymbol{v}^2\right) \;=\; (\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{\nabla})(m\boldsymbol{v})$$

と書き直せる。さらに，速度の場は時間と位置座標の関数であるので，その時間微分は

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} \;=\; \frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} + (\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{\nabla})\boldsymbol{v}$$

であり，(26.12) は

$$m \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} \;=\; -\boldsymbol{\nabla} V \tag{26.13}$$

となる。すなわち，粒子は古典的粒子の運動方程式に従うことがわかる。

なお，$\hbar \to 0$ の極限で，ハミルトニアン H について

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H \;=\; 0, \qquad H \;=\; \frac{1}{2m}\Big(\boldsymbol{\nabla} S(\boldsymbol{x}, t)\Big)^2 + V(\boldsymbol{x}, t) \tag{26.14}$$

が成り立つ。第２式では粒子の運動エネルギーが (26.10) より $(\boldsymbol{\nabla} S)^2/2m$ と表すことができることを用い，第１式は (26.11) から得られる。この方程式は **ハミルトン-ヤコビ**（Hamilton-Jacobi）の微分方程式と呼ばれ，古典力学の一つの定式化である。

波動関数 ψ がエネルギー固有値 E の定常状態を表すとき，

$$\frac{\partial A}{\partial t} \;=\; 0, \qquad \frac{\partial S}{\partial t} \;=\; -E \tag{26.15}$$

が成り立ち，２つの方程式 (26.4) と (26.5) は

$$(\boldsymbol{\nabla} S)^2 - 2m(E - V) \;=\; \hbar^2 \frac{\nabla^2 A}{A}, \qquad \boldsymbol{\nabla} \cdot (A^2 \, \boldsymbol{\nabla} S) \;=\; 0 \tag{26.16}$$

となる。第１式において右辺を 0 とする（$\hbar \to 0$）と古典近似になる。

26.2　WKB 近似

26.2.1　プランク定数についての級数展開

ポテンシャルが時間によらない場合，すなわち，ハミルトニアンが時間によらない場合には，波動関数の時間依存性は分離することができる。そこで，時間因子を分離して

$$\psi(\boldsymbol{x},t) \;=\; \exp\Big(-\frac{i}{\hbar}Et\Big)\,u(\boldsymbol{x}), \qquad u(\boldsymbol{x}) \;=\; C\exp\Big(\frac{i}{\hbar}S(\boldsymbol{x})\Big) \tag{26.17}$$

と書ける。これを時間に依存するシュレディンガー方程式 (26.1) に代入して

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi \;=\; E\,\psi, \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi \;=\; -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{i}{\hbar}\nabla^2 S-\frac{1}{\hbar^2}(\boldsymbol{\nabla}S)^2\right]\psi$$

より，$S(\boldsymbol{x})$ についての方程式

$$\frac{1}{2m}\Big(\boldsymbol{\nabla}S(\boldsymbol{x})\Big)^2-[\,E-V(\boldsymbol{x})\,]-\frac{i\hbar}{2m}\nabla^2 S(\boldsymbol{x}) \;=\; 0 \tag{26.18}$$

が得られる。

以下では，簡単のため，１次元の運動を考える。関数 $S(x)$ をプランク定数 $\hbar$ についてべき級数展開する：

$$S \;=\; S_0+\hbar S_1+\hbar^2 S_2+\cdots. \tag{26.19}$$

これを $S(x)$ についての方程式 (26.18) に代入すると，x についての微分を S', S'' などと表して，

$$\frac{1}{2m}\Big(S_0'+\hbar S_1'+\cdots\Big)^2-[\,E-V(x)\,]-\frac{i\hbar}{2m}\Big(S_0''+\hbar S_1''+\cdots\Big) \;=\; 0$$

となる。この式は $\hbar$ の各べきに対して成り立つ。$\hbar$ を含まない項，$\hbar$ の１次の項は

$$-{S_0'}^2+2m(E-V) \;=\; 0, \tag{26.20}$$

$$iS_0''-2S_0'S_1' \;=\; 0 \tag{26.21}$$

である（$\hbar$ の２次の項は $iS_1''-2S_0'S_2'-{S_1'}^2$）。

図 26.1 に示すようなポテンシャルの場合，$E=V(x)$ となる $x=a$ を **転回点**（あるいは，**回帰点**）とよぶ。$x<a$ の領域１では，エネルギー E がポテンシャル $V(x)$ よりも高く，局所的な波数 $k(x)$ が実数で定義される。一方，$x>a$ の領域２では，エネルギー E がポテンシャル $V(x)$ よりも低く，局所的な指数 $\kappa(x)$ が用いられる。領域２は古典的には到達できない領域である。

$E>V(x)$ の領域１

粒子の局所的な波数に相当する量を定義する：

$$k(x) \;=\; \frac{\sqrt{2m(E-V(x))}}{\hbar}. \tag{26.22}$$

(26.20) の解（第 0 近似）は関数 $k(x)$ を用いて表すことができ，それを (26.21) に代入して第 1 近似が求まる：

$$S_0(x) \;=\; \pm\hbar \int_a^x \mathrm{d}x'\, k(x'), \qquad S_1(x) \;=\; \frac{i}{2}\log k(x). \tag{26.23}$$

この結果を (26.17) に代入して，波動関数 $u(x)$ は $\hbar$ の 1 次までの近似で

$$u(x) \;=\; \frac{C_+}{\sqrt{k(x)}}\exp\Big(i\int_a^x \mathrm{d}x'\, k(x')\Big) + \frac{C_-}{\sqrt{k(x)}}\exp\Big(-i\int_a^x \mathrm{d}x'\, k(x')\Big) \tag{26.24}$$

と表せる（C_+，C_- は積分定数）。表現を簡単にするため，次の積分を定義すると

$$\eta(x,a) \;=\; \int_x^a \mathrm{d}x'\, \frac{\sqrt{2m\,|E-V(x')|}}{\hbar}. \tag{26.25}$$

領域 1 における WKB 近似の波動関数は

$$u_1(x) \;=\; \frac{C_+}{\sqrt{k(x)}}\, e^{-i\eta(x,a)} + \frac{C_-}{\sqrt{k(x)}}\, e^{i\eta(x,a)} \qquad (\, x < a\,) \tag{26.26}$$

となる。$\eta(x,a)$ は転回点 a から測った位相であり，局所的位相と呼ぶことができる。$\eta(x,a) \geq 0$ であり，x が転回点から離れるほど $\eta(x,a)$ の値は大きくなる。従って，第 1 項は正の向きの波（x が増加するに伴って位相も増加する）を，第 2 項は負の向きの波を表す。

$E < V(x)$ の領域 2

ポテンシャルがエネルギーより大きい領域では，波動関数は指数関数的に減少・増大する。その指数 $\kappa(x)$ を

$$\kappa(x) \;=\; \frac{\sqrt{2m(V(x)-E)}}{\hbar} \tag{26.27}$$

と定義すると，

$$\begin{aligned} S_0(x) \;&=\; \pm i\hbar\int_a^x \mathrm{d}x'\, \kappa(x'), \\ S_1(x) \;&=\; \frac{i}{2}\log\kappa(x) \end{aligned} \tag{26.28}$$

が得られる。これより，波動関数は，$\hbar$ の 1 次までの近似で

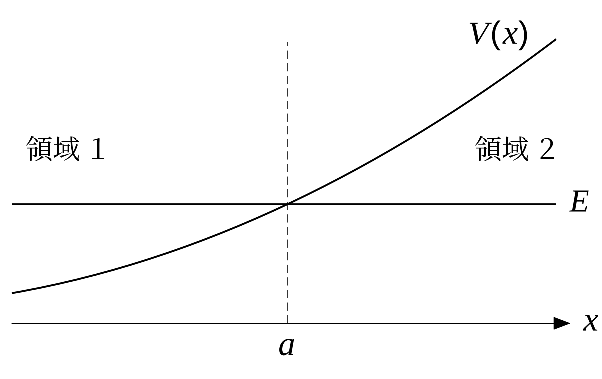

図 26.1: 転回点付近のポテンシャル

$$u(x) \;=\; \frac{D_+}{\sqrt{\kappa(x)}}\exp\Big(\int_a^x \mathrm{d}x'\, \kappa(x')\Big) + \frac{D_-}{\sqrt{\kappa(x)}}\exp\Big(-\int_a^x \mathrm{d}x'\, \kappa(x')\Big) \tag{26.29}$$

と表せる（D_+，D_- は積分定数）。(26.25) で定義した η を用いると

$$u_2(x) \;=\; \frac{D_+}{\sqrt{\kappa(x)}}\, e^{\eta(a,x)} + \frac{D_-}{\sqrt{\kappa(x)}}\, e^{-\eta(a,x)} \qquad (\, x > a\,) \tag{26.30}$$

となる。$\eta(a,x) \geq 0$ であり，x が転回点から離れるほど $\eta(a,x)$ の値は大きくなる。よって，第 1 項と第 2 項は，それぞれ，指数関数的に増大する項と減少する項である。

このように，WKB 近似は古典力学に対して $\hbar$ の 1 次の項まで取り入れた近似であるので，準古典的近似とも呼ぶ。なお，プランク定数についてのべき級数展開は漸近展開である。級数展開は一般には収束しないが，展開を有限個の項で止めたときに良い近似を与える展開である。

26.2.2 WKB 近似が成り立つ条件

ハミルトニアンが時間によらない場合，シュレディンガー方程式を書き直して得られた $S(x)$ についての方程式 (26.18) は

$$\Big(S'(x)\Big)^2 - i\hbar\, S''(x) \;=\; 2m\,[\,E - V(x)\,] \tag{26.31}$$

である。左辺の第 2 項がプランク定数 $\hbar$ を含む項であるので，第 2 項が第 1 項に比べて十分小さいときには，WKB 近似は成り立つ：

$$1 \;\gg\; \left|\frac{\hbar S''(x)}{S'(x)^2}\right| \;=\; \left|\left(\frac{\hbar}{S'(x)}\right)'\right|. \tag{26.32}$$

右辺の $\hbar/S'(x)$ に，$S(x)$ の $\hbar$ についての級数展開を代入した

$$\frac{\hbar}{S'(x)} \;=\; \frac{\hbar}{S_0'(x)+S_1'(x)+\cdots} \;=\; \frac{1}{\pm\,k(x)+\dfrac{i}{2\hbar}\,\dfrac{k'(x)}{k(x)}+\cdots}.$$

において，分母を第 1 項で近似して

$$1 \;\gg\; \left|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\frac{1}{k(x)}\right| \;=\; \left|\frac{\lambda(x)}{2\pi}\,\frac{1}{k(x)}\,\frac{\mathrm{d}k(x)}{\mathrm{d}x}\right| \tag{26.33}$$

が得られる。ここに，

$$\lambda(x) \;=\; \frac{2\pi}{k(x)} \tag{26.34}$$

は局所的（x の関数としての）ド・ブロイ波長である。すなわち，ド・ブロイ波長の距離を進む間に，波数の変化の割合が無視できるとき，WKB 近似が成り立つと言える。

たいていの場合，$E = V(x)$ となるような点（転回点）の近くを除けば，WKB 近似はよい近似になっている。転回点では局所的な波数が $k(x) = 0$ となり，古典的には，粒子の速度は 0 になって逆向きに運動し始める。また，ポテンシャルの変化が大きくなる点の近くでも，WKB 近似は適用できなくなる。

26.2.3 転回点近傍における線形近似とエアリー関数

上で求めた領域 1 の解 (26.26) と領域 2 の解 (26.30) を，転回点で接続しなければならない。しかし，これらの解は WKB 近似の解であり，WKB 近似は転回点の近くでは成り立た

ない。従って，$x = a$ の近くでは，WKB 近似を用いずに正確な解を求めなければならない。通常，転回点の近傍ではポテンシャル $V(x)$ は線形で近似でき，厳密解が求められる。

WKB 近似を用いるとき，ポテンシャル $V(x)$ は一般にゆっくりと変化すると仮定する。このとき，ポテンシャルを転回点 $x = a$ のまわりで展開し，その１次までの項で近似する：

$$V(x) \;=\; V(a) + V'(a)\,(x-a) \;=\; E + V'(a)\,(x-a). \tag{26.35}$$

ここに，$V'(a)$ は $x = a$ におけるポテンシャル $V(x)$ の微分係数である。線形近似のポテンシャルをシュレディンガー方程式に代入すると

$$\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} - v_a(x-a)\,u(x) \;=\; 0, \qquad v_a \;=\; \frac{2m}{\hbar^2}\,V'(a) \tag{26.36}$$

となる。

エアリー関数

シュレディンガー方程式 (26.36) は変数変換

$$z \;=\; v_a^{1/3}\,(x-a) \tag{26.37}$$

によって，

$$\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}z^2} - zu \;=\; 0 \tag{26.38}$$

となる。この微分方程式は２つの線形独立な解をもち，Ai(x) と Bi(x) で表され，エアリー関数（Airy function）と呼ばれる。図 26.2 にエアリー関数の振る舞いを示す。それぞれ，次の積分で定義される：

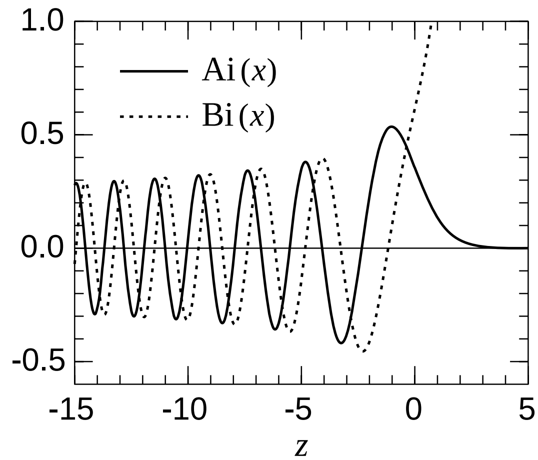

図 26.2: エアリー関数

$$\mathrm{Ai}(z) \;=\; \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \cos\Big(\frac{t^3}{3} + zt\Big)\,\mathrm{d}t, \tag{26.39}$$

$$\mathrm{Bi}(z) \;=\; \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \left[\sin\Big(\frac{t^3}{3} + zt\Big) + \exp\Big(\frac{-t^3}{3} + zt\Big)\right]\mathrm{d}t. \tag{26.40}$$

$z < 0$ の領域では，どちらも 0 のまわりで振動する。$z \to -\infty$ で振動は速くなり振幅は減衰する。$z \to -\infty$ の漸近形は

$$\mathrm{Ai}(-z) \;\approx\; \frac{1}{\sqrt{\pi}z^{1/4}}\sin\Big(\frac{2}{3}z^{3/2} + \frac{1}{4}\pi\Big), \quad \mathrm{Bi}(-z) \;\approx\; \frac{1}{\sqrt{\pi}z^{1/4}}\cos\Big(\frac{2}{3}z^{3/2} + \frac{1}{4}\pi\Big) \tag{26.41}$$

である。一方，$z > 0$ の領域では，z の増加に伴い Ai(z) は指数関数的に 0 へと減衰し，Bi(z) は正値で指数関数的に増加する。$z \to +\infty$ の漸近形は次の式で与えられる：

$$\mathrm{Ai}(z) \;\approx\; \frac{1}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}}\exp\Big(-\frac{2}{3}z^{3/2}\Big), \quad \mathrm{Bi}(z) \;\approx\; \frac{1}{\sqrt{\pi}z^{1/4}}\exp\Big(+\frac{2}{3}z^{3/2}\Big). \tag{26.42}$$

シュレディンガー方程式 (26.38) の一般解は，F と G を 2 つの定数として，エアリー関数を用いて次のように表せる：

$$u \;=\; F\,\mathrm{Ai}(z) + G\,\mathrm{Bi}(z). \tag{26.43}$$

$z \to +\infty$ の漸近形は

$$u(x) \;\to\; \frac{1}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}}\left[F\exp\Big(-\frac{2}{3}z^{3/2}\Big) + 2G\exp\Big(+\frac{2}{3}z^{3/2}\Big)\right], \tag{26.44}$$

$z \to -\infty$ の漸近形は

$$\begin{aligned} u(x) \;&\to\; \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}}\left[F\sin\Big(\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{1}{4}\pi\Big) + G\cos\Big(\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{1}{4}\pi\Big)\right] \\ &=\; \frac{1}{2\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}}\left[(G - iF)\exp\Big(\frac{2i}{3}(-z)^{3/2} + \frac{i\pi}{4}\Big)\right. \\ &\qquad\left. + (G + iF)\exp\Big(-\frac{2i}{3}(-z)^{3/2} - \frac{i\pi}{4}\Big)\right] \end{aligned} \tag{26.45}$$

となる。これらの漸近形は $|z| > 2$ で十分良い近似である。WKB 近似が成り立つ条件は

$$1 \;\gg\; \left|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\frac{1}{k(x)}\right| \;=\; \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\hbar^2}{2m}}\,\frac{|\,V'(x)\,|}{|\,V(x) - E\,|^{3/2}} \quad \text{より} \quad |\,v_a^{1/3}(x - a)\,| \;\gg\; \frac{1}{2^{2/3}} \tag{26.46}$$

である。

26.2.4　線形ポテンシャルを用いた接続条件

WKB 近似が成り立つ範囲を 図 26.3 に模式的に示す。左側の点線の左側では領域 1 の近似解 (26.26) を用いることができ，右側の点線の右側では領域 2 の近似解 (26.30) を用いることができる。そこで，WKB 近似が成り立つ領域にまたがって，ポテンシャルの線形近似を適用する。線形近似したときのシュレディンガー方程式の解はエアリー関数で表されるので，その漸近形を媒介として，領域 1 の WKB 近似解と領域 2 の WKB 近似解を接続させることを考える。

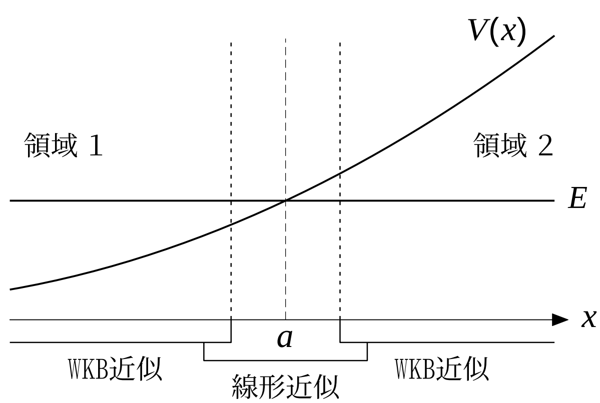

図 26.3: 転回点付近の線形近似

エアリー関数の漸近形に $\frac{2}{3}\,|z|^{3/2}$ が現れるが，この因子は

$$\frac{2}{3}\,|z|^{3/2} \;=\; \frac{2}{3}\,|v_a|^{1/2}\,|x - a|^{3/2} \;=\; \left|\int_a^x \mathrm{d}x'\,|v_a(x' - a)|^{1/2}\right|$$

と表すことができる。また，ポテンシャルの線形近似の式 (26.35) より

$$v_a(x - a) \;=\; \frac{2m}{\hbar}\,V'(a)(x - a) \;\approx\; \frac{2m}{\hbar^2}\Big(V(x) - E\Big)$$

である。よって,

$$\int_a^x \mathrm{d}x' \, |v_a(x'-a)|^{1/2} \;\approx\; \int_a \mathrm{d}x' \, \frac{\sqrt{2m|V(x)-E|}}{\hbar}$$

と表せるので,η の定義より,

$$\frac{2}{3}\,|z|^{3/2} \;\approx\; |\,\eta(a,x)\,| \;=\; \begin{cases} \eta(x,a) & x<a \\ \eta(a,x) & x>a \end{cases} \tag{26.47}$$

となる。

領域 1 と領域 2 の WKB 近似解は,それぞれ,(26.26) と (26.30) で与えられる:

$$\begin{aligned} u_1(x) &= \frac{C_+}{\sqrt{k(x)}}\, e^{-i\eta(x,a)} + \frac{C_-}{\sqrt{k(x)}}\, e^{+i\eta(x,a)} && (\,x<a\,) \\ u_2(x) &= \frac{D_+}{\sqrt{\kappa(x)}}\, e^{+\eta(a,x)} + \frac{D_-}{\sqrt{\kappa(x)}}\, e^{-\eta(a,x)} && (\,x>a\,) \end{aligned} \tag{26.48}$$

一方,転回点を含む領域の線形近似解は,$x<a$ と $x>a$ に対して,それぞれ,(26.45) と (26.44) で与えられ,(26.47) を代入して次のように表せる($\eta(a,x)=-\eta(x,a)$ に注意):

$$\begin{aligned} u_1(x) &= \frac{v_a^{1/6}}{2\sqrt{\pi k(x)}}\Big[\,(G+iF)\, e^{-i\eta(x,a)-i\pi/4} + (G-iF)\, e^{+i\eta(x,a)+i\pi/4}\,\Big] && (\,x<a\,) \\ u_2(x) &= \frac{v_a^{1/6}}{2\sqrt{\pi\kappa(x)}}\Big[\,2Ge^{+\eta(a,x)} + Fe^{-\eta(a,x)}\,\Big] && (\,x>a\,) \end{aligned} \tag{26.49}$$

(26.48) と (26.49) を比較して WKB 近似解の係数と線形近似解の係数の関係が決まり,

$$\begin{aligned} C_+ &= \frac{v_a^{1/6}}{2\sqrt{\pi}}\,(G+iF)\,e^{-i\pi/4} & \qquad D_+ &= \frac{v_a^{1/6}}{\sqrt{\pi}}G \\ C_- &= \frac{v_a^{1/6}}{2\sqrt{\pi}}\,(G-iF)\,e^{+i\pi/4} & \qquad D_- &= \frac{v_a^{1/6}}{2\sqrt{\pi}}F \end{aligned}$$

これより,領域 1 と領域 2 の WKB 近似解の係数の関係が求まる:

$$C_\pm \;=\; \Big(\,\frac{1}{2}D_+ \pm iD_-\,\Big)\exp\Big(\mp\frac{i\pi}{4}\Big). \tag{26.50}$$

これが(ポテンシャルが右上がりの場合の)求める接続条件である。すなわち,(26.48) の領域 2 における WKB 近似解

$$u_2(x) \;=\; \frac{D_+}{\sqrt{\kappa(x)}}\, e^{+\eta(a,x)} + \frac{D_-}{\sqrt{\kappa(x)}}\, e^{-\eta(a,x)}$$

に接続する,領域 1 の WKB 近似解は

$$u_1(x) \;=\; \frac{1}{\sqrt{k(x)}}\left[\,D_+ \sin\Big(\eta(a,x)+\frac{\pi}{4}\Big) + 2D_- \cos\Big(\eta(a,x)+\frac{\pi}{4}\Big)\right] \tag{26.51}$$

と表される。特に，領域２で指数関数的に減少するだけで，増大する項がない場合（$D_+ = 0$），$D_- = D$ と書いて

$$u_2(x) \ = \ \frac{D}{\sqrt{\kappa(x)}}\, e^{-\eta(a,x)} \tag{26.52}$$

これに接続する領域１の解は

$$u_1(x) \ = \ \frac{2D}{\sqrt{k(x)}} \cos\Big(\eta(a,x) + \frac{\pi}{4}\Big) \tag{26.53}$$

となる。

右下がりのポテンシャルの場合

図 26.4 に示すような右下がりのポテンシャルの場合も同様である。$E = V(x)$ となる転回点を $x = b$ とする。

エネルギー E がポテンシャル $V(x)$ よりも高い $x > b$ を領域１とし，エネルギー E がポテンシャル $V(x)$ よりも低い $x < b$ を領域２とする。

$x = b$ を含んで WKB 近似が成り立つ２つの領域にまたがる領域において，ポテンシャルを線形近似し，それを媒介として，２つの領域の WKB 近似解を接続する。

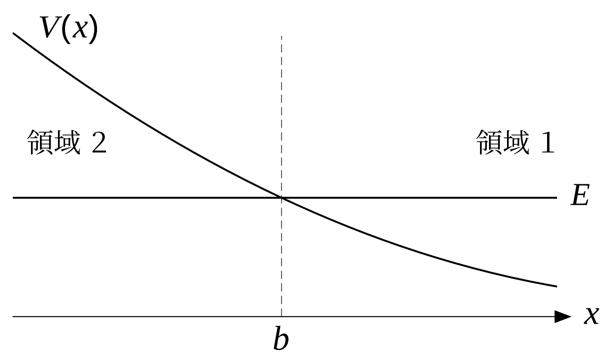

図 26.4: 転回点付近のポテンシャル

領域１と領域２の WKB 近似解は (26.48) と同様にして

$$\begin{aligned} u_1(x) \ &= \ \frac{C_+}{\sqrt{k(x)}}\, e^{+i\eta(b,x)} + \frac{C_-}{\sqrt{k(x)}}\, e^{-i\eta(b,x)} \qquad (\, x > b\,) \\ u_2(x) \ &= \ \frac{D_+}{\sqrt{\kappa(x)}}\, e^{+\eta(x,b)} + \frac{D_-}{\sqrt{\kappa(x)}}\, e^{-\eta(x,b)} \qquad (\, x < b\,) \end{aligned} \tag{26.54}$$

である。線形近似の領域にはエアリー関数を用いて両者を接続する。その結果は

$$C_\pm \ = \ \Big(\frac{1}{2}D_+ \mp iD_-\Big) \exp\Big(\pm\frac{i\pi}{4}\Big) \tag{26.55}$$

となる。これが，ポテンシャルが右下がりの場合の，求める接続条件である。すなわち，領域２での WKB 近似の解

$$u_2(x) \ = \ \frac{D_+}{\sqrt{\kappa(x)}}\, e^{+\eta(x,b)} + \frac{D_-}{\sqrt{\kappa(x)}}\, e^{-\eta(x,b)}$$

に接続する領域１での WKB 近似解は

$$u_1(x) \ = \ \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \Big[\, 2D_- \cos\Big(\eta(b,x) - \frac{\pi}{4}\Big) - D_+ \sin\Big(\eta(b,x) - \frac{\pi}{4}\Big)\Big] \tag{26.56}$$

と表される。

26.3 ボーア-ゾンマーフェルトの量子化規則

図 26.5 に示すように，２つの転回点 $x = x_1$，$x = x_2$ をもつポテンシャル $V(x)$ の中での粒子の運動を WKB 近似で考える。古典的に運動が許されるのは $E > V(x)$ を満たす領域２（$x_1 < x < x_2$）である。領域１（$-\infty < x < x_1$）と領域３（$x_2 < x < \infty$）では $E < V(x)$ であり，古典的には到達できない領域である。ここでは，まず，領域３での WKB 近似の解から，領域２での解を接続公式を用いて求める。ついで，領域２で得られた解を領域１へ接続するが，その際に領域２の解に要求される制限を求める。

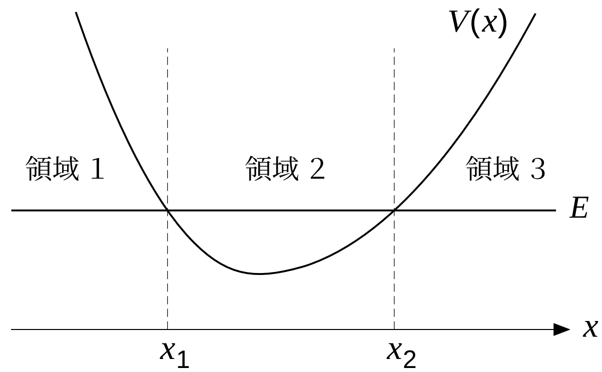

図 26.5: ２つの転回点をもつポテンシャル

領域２と領域３の境界である転回点 $x = x_2$ から測った位相を定義する：

$$\eta(x_2, x) \ = \ \int_{x_2}^{x} \mathrm{d}x' \, \frac{\sqrt{2m\,|E - V(x')|}}{\hbar}. \tag{26.57}$$

領域３において，$V(x) > E$ であるので，波動関数が有界である条件から，波動関数は右に向かって指数関数的に減衰する成分だけをもつ：

$$(\text{領域３}) \qquad u_3(x) \ = \ \frac{D}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp\Big(-\eta(x_2, x)\Big). \tag{26.58}$$

この解に接続する領域２の解は，(26.52) と (26.53) の関係を用いて

$$(\text{領域２}) \qquad u_2(x) \ = \ \frac{2D}{\sqrt{k(x)}} \cos\Big(\eta(x_2, x) + \frac{\pi}{4}\Big) \tag{26.59}$$

である。この解を領域１の解に接続するため，x_2 から x までの積分で定義されている位相 $\eta(x_2, x)$ を，x_2 から x_1 までの積分と x_1 から x までの積分に分ける：

$$\eta(x_2, x) \ = \ \int_{x_2}^{x} \mathrm{d}x' \, k(x') \ = \ \int_{x_2}^{x_1} \mathrm{d}x' \, k(x') + \int_{x_1}^{x} \mathrm{d}x' \, k(x') \ = \ \eta(x_2, x_1) + \eta(x_1, x)$$

第１項の積分の下限と上限を入れ替えると，$\eta(x_2, x_1) = -\eta(x_1, x_2)$ であるので，

$$\eta(x_2, x) \ = \ \eta(x_1, x) - \frac{\pi}{2} - \theta \tag{26.60}$$

と書くことができて，領域２の波動関数は

$$(\text{領域２}) \qquad u_2(x) \ = \ \frac{2D}{\sqrt{k(x)}} \cos\Big(\eta(x_1, x) - \frac{\pi}{4} - \theta\Big) \tag{26.61}$$

と書き直すことができる。ここに,

$$\theta \;=\; \eta(x_1, x_2) - \frac{\pi}{2} \tag{26.62}$$

である。領域２の波動関数 (26.61) を領域１へ接続することを考える。領域１では波動関数が有界である条件から，波動関数は左へ向かって指数関数的に減衰する成分だけをもつ。そのためには，(26.56) において，$D_+ = 0$ で与えられる位相をもたなければならない：

$$\text{（領域２）}\qquad u_2(x) \;=\; \frac{2D'}{\sqrt{k(x)}}\cos\Big(\eta(x_1, x) - \frac{\pi}{4}\Big). \tag{26.63}$$

すなわち，(26.61) に現れる位相 θ は

$$\theta \;=\; \int_{x_1}^{x_2} \mathrm{d}x'\, k(x') - \frac{\pi}{2} \;=\; n\pi \qquad (\, n = 0,\, 1,\, 2,\, \cdots) \tag{26.64}$$

を満たし，よって,

$$2\pi\hbar\Big(n + \frac{1}{2}\Big) \;=\; 2\hbar\int_{x_1}^{x_2} \mathrm{d}x\, k(x) \qquad (\, n = 0,\, 1,\, 2,\, \cdots)$$

でなければならない。ここで，$\hbar k$ は運動量であるので，局所的に定義される運動量の積分が

$$2\pi\hbar\Big(n + \frac{1}{2}\Big) \;=\; 2\int_{x_1}^{x_2} \mathrm{d}x\, p(x), \qquad (\, n = 0,\, 1,\, 2,\, \cdots) \tag{26.65}$$

であることを意味していて，ここに,

$$p(x) \;=\; \sqrt{2m(E - V(x))} \tag{26.66}$$

である。(26.65) は WKB 近似における束縛状態の条件である。

図 26.6 に示すような，横軸に座標 x，縦軸に運動量 p をとった空間（この場合は１次元運動なので平面）を位相空間という。式 (26.65) は，位相空間内での，粒子の古典的な閉じた軌道（外周の楕円）が囲む面積が $2\pi\hbar = h$ を単位として量子化されることを表している。$n + \frac{1}{2}$ を n で置き換えれば，前期量子論における **ボーア-ゾンマーフェルトの量子化規則** に一致する。

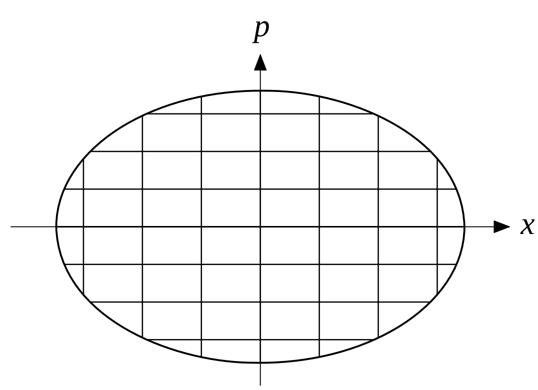

図 26.6: 量子化条件

束縛状態の波動関数は，２つの転回点の外側では指数関数的に単調に減少し，転回点の間では振動する。従って，波動関数の節（$u(x) = 0$ となる点）は転回点の間でだけ生じ得る。この節の数が，WKB 近似の量子数 n に一致する。本来，WKB 近似は n が大きいときによい近似になるが，かなり小さい n の場合でも良い近似になっていることが多い。