

物理学における WKB 法の応用

今井功

I. まえがき

WKB 法は量子力学と古典力学との関連を明らかにする目的で行われた Wentzel, Brillouin, Kramers の互いに独立な研究(1926)に始まる。すなわち, Schrödinger の方程式で, Planck の定数 \hbar を 0 にする極限をとれば古典力学の方程式が得られることを示し, 更に, \hbar を小さいパラメタとして逐次近似的に Schrödinger 方程式を解こうという方法である。

しかし, 数学的方法そのものは既に Jeffreys(1923) によって大筋が作られていた。また Jeffreys 自身の教科書(1956)によると, その思想は G. Green の研究(断面積がゆるやかに変る水路を潮汐波が伝播するばあい, 反射によるエネルギー損失のないこと)を論ずる)(1837)にさかのぼり, さらには, それより前の Carlini(1817) の Bessel 函数の漸近表示についての研究に萌芽が見られるという。要するに, WKB 法は Singular Perturbation の問題をとり扱うための 1 つの方法である。

数学的な面については Langer の研究を中心として多くの発展があるが, この解説では, 物理学の各方面で WKB 法がどのように応用されているかを散発的に述べるに止める。

WKB 法はその登場以来主として量子力学において重要な応用が見られ, それについて既に成書に多く記されているので, ここでは割愛する。例えば Bohm の教科書(1951)を見て頂きたい。WKB 法について最近の研究まで取り入れた優れた記述としては橋本英典(1960)を推奨したい。

なお, Langer 教授の隠退を記念して開催された“微分方程式の漸近解およびその応用”に関するシンポジウム(1964)のプロシーディングスが Wilcox によって編集されている。この中の諸論文とその参考文献からも最近の傾向をある程度知ることができるであろう。

2 Schrödinger の方程式

1 粒子に対する S-方程式は、慣用の記号を用いて、

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$$

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + V(\mathbf{r}), \quad p = |\mathbf{P}|, \quad \mathbf{P} = \frac{\hbar}{i} \text{grad}$$

$$= \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \nabla^2 + V(\mathbf{r}), \quad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Planck の定数 \hbar を 0 とする極限で上の S-方程式が古典力学の方程式に移行することを示そう。

ただし、いまここでいきなり $\hbar \rightarrow 0$ の極限をとることはできない。

$$\psi(\mathbf{r}, t) = A \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} W(\mathbf{r}, t) \right\}$$

とおけば

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\text{grad } W)^2 + V - \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 W = 0.$$

ここで $\hbar \rightarrow 0$ とすると、

$$\frac{\partial W}{\partial t} + H(\mathbf{r}, \mathbf{P}) = 0$$

$$\mathbf{P} = \text{grad } W, \quad H = \frac{1}{2m} p^2 + V(\mathbf{r})$$

上式は古典力学での Hamilton-Jacobi の方程式である。 W は Hamilton の主函数。

定常状態では

$$\psi = e^{-i\frac{Et}{\hbar}} u(\mathbf{r}),$$

$$W(\mathbf{r}, t) = S(\mathbf{r}) - Et$$

とおくことにより

$$u(\mathbf{r}) = A \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S(\mathbf{r}) \right\},$$

$$\frac{1}{2m} (\text{grad } S)^2 - [E - V(\mathbf{r})] - \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 S = 0$$

近似を進めるには

$$W = W_0 + \frac{\hbar}{i} W_1 + \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 W_2 + \dots$$

とおいて、 W_0, W_1, \dots を逐次求めればよい。 W_0 は古典力学での主函数。 W_1 は

$$-\frac{\partial W_1}{\partial t} = \frac{1}{m} (\text{grad } W_0 \cdot \text{grad } W_1) + \frac{1}{2m} \nabla^2 W_0$$

の解、...である。

以上が WKB 法の発端である。

3. 常微分方程式

WKB 法の実際問題への応用は主として常微分方程式についてなされた。

定常な Schrödinger 方程式は

$$[\nabla^2 + k^2 P(\mathbf{r})] \psi = 0 \quad (3.1)$$

の形に書ける。ただし

$$k^2 P = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V).$$

なお、電磁波の伝播の式も上の (3.1) の形に帰着される。ただし、 $N(x, y, z)$ を媒質の屈折率とすると $P = N^2$ 。また k は波数、すなわち $k = 2\pi/\lambda$; λ は波長。

(3.1) を解くための標準的な方法は、適当な曲線座標 (ξ, η, ζ) を導入して、変数分離を行うことである。(もちろん、そのような可能性はきわめて特殊のばあいに限られる。)

すなわち

$$\psi = \sum C(m) X_m(\xi) Y_m(\eta) Z_m(\zeta) \quad (3.2)$$

と仮定する。ここで m はパラメタ、 $C(m)$ は定数。また X_m, Y_m, Z_m 等は次の形の 2 次の常微分方程式を満足する。

$$\frac{d^2 \Phi}{dx^2} + a^2 P(x) \Phi = 0 \quad (3.3)$$

a はパラメタ m に依存する定数である。

一般に、境界値問題の解としては、(3.2)の式は無限級数あるいは定積分の形をとる。したがつてその収束性その他を調べるには $m \rightarrow \infty$ に対する X_m, Y_m, Z_m の性質を知る必要がある。 $m \rightarrow \infty$ は、ふつう $a \rightarrow \infty$ に對応する。したがつて(3.3)の解 $\Phi(x)$ が $a \rightarrow \infty$ に対していかなる性質をもつかが重要な問題となる。これがWKB法の課題である。

4. WKB法の1つの方式

(3.3)の常微分方程式：

$$\frac{d^2 \Phi}{dx^2} + a^2 P(x) \Phi = 0 \quad a \rightarrow \infty \quad (4.1)$$

の解は以下のような形にあらわすことができる(Imai (1956))。

変数変換：

$$z = \int_0^x P^{\frac{1}{2}} dx, \quad \Phi = P^{-\frac{1}{4}} \Psi \quad (4.2)$$

により、(4.1)は

$$\frac{d^2 \Psi}{dz^2} + (a^2 - Q) \Psi = 0 \quad (4.3)$$

$$Q = P^{-\frac{1}{4}} \frac{d^2 P^{\frac{1}{4}}}{dz^2} = -P^{-\frac{3}{4}} \frac{d^2 P^{-\frac{1}{4}}}{dx^2} \quad (4.4)$$

$P=O(1), Q=O(1)$ とすれば、(4.3)は近似的に

$$\frac{d^2 \Psi_0}{dz^2} + a^2 \Psi_0 = 0$$

$$\therefore \Psi_0 = A e^{iaz} + B e^{-iaz}$$

近似を高めるには

$$\Psi = \exp \left[\pm i a z + \frac{\varphi_1}{ia} + \frac{\varphi_2}{(ia)^2} + \dots \right]$$

において、 $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ を逐次定めればよい。

その結果、(4.1)の独立な2つの特解として

$$\Psi_{1,2} = \exp \left[\pm i a z \pm \frac{1}{2ia} Q_1(z) + \frac{1}{4a^2} Q(z) + O(a^{-3}) \right] \quad (4.5)$$

を得る。ここに

$$Q_1 = \int_0^z \left(Q + \frac{5}{36} \frac{1}{z^2} \right) dz + \frac{5}{36} \frac{1}{z}.$$

$P(0) \neq 0$ のばあいには(4.5)の形の漸近表示が確かに可能である。

$$P(x) = a_1 x (1 + b_1 x + b_2 x^2 + \dots), \quad a_1 \neq 0$$

のときは、(i) $x \neq 0$, (ii) $x \neq 0$ に応じて異なる形の漸近表示式を得る。

$x \neq 0$ に対しては上の(4.5)の漸近式がそのまま成り立つ。 $x \neq 0$ のばあいは以下のよう

な変換を行なえば、(4.6)の形の漸近表示が得られる。

$$z = \frac{2}{3} a_1^{\frac{1}{2}} x^{\frac{3}{2}} \left\{ 1 + \frac{3}{10} b_1 x + \left(\frac{3}{14} b_2 - \frac{3}{56} b_1^2 \right) x^2 + \dots \right\},$$

$$x = t - \frac{1}{5} b_1 t^2 - \left(\frac{1}{7} b_2 - \frac{22}{175} b_1^2 \right) t^3 - \dots$$

$$t = \left(\frac{3}{2} a_1^{-\frac{1}{2}} z \right)^{\frac{2}{3}}$$

$$Q = - \left(\frac{5}{36} \frac{1}{z^2} + \lambda z^{-\frac{2}{3}} + \lambda_0 + \lambda_1 z^{\frac{2}{3}} + \dots \right)$$

$$\lambda = - \frac{3}{35} \left(\frac{3}{2} a_1 \right)^{-\frac{2}{3}} (5b_2 - 3b_1^2),$$

$$\lambda_0 = - \frac{4}{75} \frac{1}{a_1} (25b_3 - 35b_1b_2 + 14b_1^3),$$

$$\lambda_1 = - \frac{27}{26950} \left(\frac{3}{2} a_1 \right)^{-\frac{4}{3}} (6125b_4 - 4350b_2^2 - 9800b_1b_3$$

$$+ 12080b_1^2b_2 - 3624b_1^4),$$

$$\Psi_{1,2} = \left(\frac{\pi a}{2} \right)^{\frac{1}{2}} i^{\pm \frac{5}{6}} z^{\frac{1}{6}} \zeta H_{\frac{1}{3}}^{(1,2)}(\eta) + O(a^{-3}), \quad z=O(a^{-1}) \quad (4.6)$$

$$\left. \begin{aligned} \zeta &= (\xi - \frac{1}{5} \lambda_1 \kappa^{-2} \xi^2)^{\frac{1}{2}}, \\ \eta &= \kappa (\xi + \frac{1}{5} \lambda_1 \kappa^{-2} \xi^2)^{\frac{3}{2}}, \\ \xi &= z^{\frac{2}{3}} + \lambda \kappa^{-2}, \\ \kappa^2 &= a^2 + \lambda_0. \end{aligned} \right\}$$

5. 境界層の熱伝達

流れの中に物体をおくと, Reynolds 数の高いばいには, 物体の表面に境界層が生ずる。いま物体の温度が流体の温度と異なるものとすると, 境界層を通して熱が伝えられる。流体は縮まないと仮定すると, 基礎方程式は

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (5.1)$$

$$\rho (u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y}) = - \frac{dp}{dx} + \mu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \quad (5.2)$$

$$\rho C_p (u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y}) = k \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \quad (5.3)$$

ただし (u, v) は流速, p は圧力, T は温度, ρ は密度, C_p は定圧比熱, k は熱伝導率, μ は粘性率。

問題は u, v, T に対する上の連立方程式を次の境界条件の下で解くことに帰着する:

$$y = 0 : \quad T = T_0(x), \quad u = v = 0$$

$$y \rightarrow \infty : \quad T = T_1(x), \quad u \rightarrow u_1(x)$$

特別なばいとして

$$T_0 - T_1 = b x^n, \quad u_1 = c x^m$$

のばいには, 上の偏微分方程式は常微分方程式になる。すなわち

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad v = -\frac{\partial \psi}{\partial x}$$

$$\eta = \left(\frac{1+m}{2} \frac{u_1}{\nu x} \right)^{\frac{1}{2}} y$$

$$\psi = \left(\frac{2}{1+m} \nu x u_1 \right)^{\frac{1}{2}} f(\eta)$$

$$\frac{T - T_1}{T_0 - T_1} = \theta(\eta)$$

とおけば

$$f''' + f f'' + \beta(1 - f'^2) = 0 \quad (5.4)$$

$$\theta'' + \sigma f \theta' - \sigma n(2 - \beta) f' \theta = 0 \quad (5.5)$$

境界条件：

$$\eta = 0 : \quad f = f' = 0, \quad \theta = 1$$

$$\eta \rightarrow \infty : \quad f' \rightarrow 1, \quad \theta \rightarrow 0$$

$$\beta = \frac{2m}{m+1}, \quad \sigma = \frac{\mu C_p}{k} \quad \text{Prandtl 数}$$

(5.4)は Falkner-Skan の方程式とよばれ、 β の種々の値に対して Hartree (1937) によつて数値解が得られている。

$$f = \frac{1}{2} \alpha \eta^2 - \frac{1}{6} \beta \eta^3 + \frac{1}{5} (2\beta - 1) \alpha^2 \eta^5 \\ + \frac{1}{6} 2(2 - 3\beta) \beta \alpha \eta^6 + \dots \quad (5.6)$$

(5.5)は変数係数の2階の常微分方程式である。

$$\theta = \exp \left[-\frac{1}{2} \sigma \int_0^\eta f d\eta \right] \theta \quad (5.7)$$

とおけば

$$\theta' - P(\eta) \theta = 0 \quad (5.8)$$

$$P(\eta) = \frac{1}{4} \sigma^2 f^2 + \sigma \left\{ \frac{1}{2} + n(2-\beta) \right\} f' \quad (5.9)$$

$$= A\eta [1 + b_1\eta + b_3\eta^3 + b_4\eta^4 + \dots] \quad (5.10)$$

ただし

$$A = \sigma \left\{ \frac{1}{2} + n(2-\beta) \right\}$$

$$b_1 = -\frac{\beta}{2\alpha}, \quad b_3 = \frac{\sigma^2 \alpha^2}{16A} - \frac{(1-2\beta)\alpha}{24}$$

$$b_4 = \frac{(2-3\beta)\beta}{60} - \frac{\sigma^2 \alpha \beta}{24A}$$

このばかり、§4の結果をそのまま適用することができる。(Imai (1958))

特に興味のあるのは壁での熱伝達係数 h である。

$$\begin{aligned} h &= \frac{q_0}{T_0 - T_1}, \quad q_0 = -k \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)_{y=0} \\ \therefore \frac{hx/k}{(u_1 z/v)^{1/2}} &= -(2-\beta)^{1/2} \left(\frac{d\theta}{d\eta} \right)_{\eta=0} \\ &\div \frac{1}{\sqrt{2-\beta}} \left[\left(\frac{1}{3} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{\Gamma(\frac{2}{3})}{\Gamma(\frac{4}{3})} \left\{ \frac{1}{2} + n(2-\beta) \right\}^{\frac{1}{3}} (\sigma \alpha)^{\frac{1}{3}} - \frac{\beta}{10\alpha} \right] \end{aligned}$$

6. 2次元の高速気流

粘性のない縮む流体の2次元的な渦無しの流れを考えよう。速度ポテンシャルを Φ 、流れの函数を Ψ とすれば、基礎方程式は

$$\left. \begin{aligned} u &= \frac{\partial \Phi}{\partial x} = \frac{\rho_1}{\rho} \frac{\partial \Psi}{\partial y} \\ v &= \frac{\partial \Phi}{\partial y} = -\frac{\rho_1}{\rho} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \end{aligned} \right\} \quad (6.1)$$

である。ここに ρ は密度、 ρ_1 は密度のディメンションをもつ定数。Hodograph 法を用ひる。すなわち

$$u = q \cos \theta, \quad v = q \sin \theta \quad (6.2)$$

として、 q, θ を独立変数に選べば

$$\frac{\partial \Phi}{\partial q} = q \frac{d}{dq} \left(\frac{\rho_1}{q\rho} \right) \frac{\partial \Psi}{\partial \theta}, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} = q \frac{\rho_1}{\rho} \frac{\partial \Psi}{\partial q} \quad (6.3)$$

さらに、速度の大きさ q の代りに

$$t = \int \frac{\rho}{q \rho_1} dq \quad (6.4)$$

を変数にとれば

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \theta} = \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial t} = -K \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \quad (6.5)$$

$$K = q \frac{d^2}{dt^2} \left(\frac{1}{q} \right) = \left(1 - \frac{q^2}{c^2} \right) \left(\frac{\rho_1}{\rho} \right)^2 \quad (6.6)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} + K \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \theta^2} = 0 \quad (6.7)$$

これは変数係数の2階の偏微分方程式である。

(6.7)は変数分離：

$$\Psi = \sum A_n T_n(t) e^{ni\theta} \quad (6.8)$$

$$T_n'' - n^2 K T_n = 0 \quad (6.9)$$

によつて解くことができる。

§3で述べたように、(6.9)式の形はWKB法の応用を示唆する。

$$\begin{aligned} \tau &= - \int K^{\frac{1}{2}} dt = - \int \left(1 - \frac{q^2}{c^2} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{dq}{q} \\ \Psi &= K^{-\frac{1}{4}} \psi \end{aligned} \quad \left. \right\} \quad (6.10)$$

とおふくと、(6.7)は

$$\nabla^2 \psi = k(\tau) \psi \quad (6.11)$$

$$k(\tau) = K^{-\frac{1}{4}} \frac{d^2 K^{\frac{1}{4}}}{d\tau^2} = -K^{-\frac{3}{4}} \frac{d^2 K^{-\frac{1}{4}}}{dt^2} \quad (6.12)$$

また、(6.9)は、 $T_n = K^{\frac{1}{4}} W_n(\tau)$ において、

$$W_n'' - n^2 W_n = k W_n \quad (6.13)$$

となる。

$\pi \rightarrow \infty$ では、第0近似として

$$W_n \sim A e^{n\tau} + B e^{-n\tau} \quad (6.14)$$

この近似に対応するのが、(6.11)では右辺を省略した

$$\nabla^2 \psi = 0 \quad (6.15)$$

である。

(6.6)式に現われる c は局所音速で、したがつて $q < c$, $q > c$ はそれぞれ亜音速 (Subsonic) あるいは超音速 (Supersonic) をあらわす。 $q \leq c$ に応じて $K \geq 0$ 、したがつて (6.10)により、亜音速では τ は実数、超音速では τ は純虚数になる ($q=c$ が $\tau=0$ に対応するように定める)。

$$\nabla^2 = \begin{cases} \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} & q < c \\ -\frac{\partial^2}{\partial |\tau|^2} + \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} & q > c \end{cases}$$

であるから、(6.15)は亜音速では Laplace 方程式、超音速では波動方程式となる。

$q=c$ なる q を c_* と書けば、 $q=c_*$ の近くで (すなわち臨界音速の近くで)

$$K(q) = a_1(q - c_*) \{ 1 + b_1(q - c_*) + b_2(q - c_*)^2 + \dots \}$$

$$k(\tau) = -\frac{5}{36} \frac{1}{\tau^2} + \lambda \tau^{-\frac{2}{3}} + \lambda_0 + \lambda_1 \tau^{\frac{2}{3}} + \dots$$

$k(\tau)$ の第1項を残した近似は遷音速 (transonic) 近似と考えられる。(Imai (1954).)

$$k(\tau) = -\frac{5}{36} \frac{1}{\tau^2} \quad (6.16)$$

では

$$W_n = \tau^{\frac{1}{2}} Z_{\frac{1}{3}}(n i \tau) \quad (6.17)$$

$$\psi = \tau^m \sin^m \alpha \{ C_1 Q_{\frac{1}{6}}^m (\cos \alpha) + C_2 Q_{\frac{5}{6}}^m (\cos \alpha) \} \quad (6.18)$$

$$= A \omega^m F \left(\frac{1}{6}, \frac{5}{6}, 1+m : \frac{\omega}{2\tau} \right)$$

$$+ B (\omega - 2\tau)^m F \left(\frac{1}{6}, \frac{5}{6}, 1-m : \frac{\omega}{2\tau} \right) \quad (6.19)$$

$$\omega = (\tau - \tau_1) + i\theta, \quad \cos \alpha = \frac{\tau_1 - i\theta}{\tau} \quad (6.20)$$

特に m が半奇数のばあいには初等函数で表わされる。

ふつう、偏微分方程式に WKB 法が応用されるのは変わり点のないばあいに限られているが、上の応用例では変わり点を含むばあいが扱われている点に興味がある。いわゆる混合型の偏微分方程式に WKB 法を応用しようとすると、いつでも変わり点の処理を必要とすることに注意しなければならない。

参考文献

寺沢寛一：数学概論「応用編」(1960) 橋本英典：WKB 法 pp. 205 - 235;

今井功：高速気流の解法 pp. 694 - 702.

D. Bohm : Quantum Theory (1951) Prentice-Hall.

丸善アジア版

H. Jeffreys & B. Swirles : Methods of Mathematical Physics (1956) pp. 523 - 527. Camb. Univ. Press.

C. H. Wilcox(ed.) : Asymptotic Solutions of Differential Equations and Their Applications (John Wiley & Sons, Inc., 1964).

I. Imai : On a refinement of the transonic approximation theory. J. Phys. Soc. Japan 9 (1954) 1009.

I. Imai : A refinement of the WKB method and its application to the electromagnetic wave theory. IRE Trans. AP-4, No. 3 (1956) 233.

I. Imai : On the heat transfer to constant-property laminar boundary layer with power-function free-stream velocity and wall-temperature distributions. Quart. Appl. Math. 16 (1958) 33.