Anharmonic oscillator の古典力学と量子力学の対比

基研での討論のために（1955, 1）
新 福 太 郎

1) $\ddot{y} + ay + by^2 = 0 \qquad (a>0 \quad b>0)$

(periodic solution をあつかう)

古典力学
(微分方程式)

初期條件　$t=0$ で　$y = A \quad \dot{y} = 0$

解の形

$$y = bc' + b^2c'' + \cdots$$
$$+ (A_1 + bA_1' + b^2A_1'' + \cdots)\cos\omega t$$
$$+ (bA_2' + b^2A_2'' + \cdots)\cos 2\omega t$$
$$+ \cdots\cdots$$
$$\equiv \mathfrak{C} + \mathfrak{a}_1\cos\omega t + \mathfrak{a}_2\cos 2\omega t + \cdots$$

$$\omega^2 = a + b\omega_1^2 + b^2\omega_2^2 + \cdots$$

方程式に代入

$$-(a + b\omega_1^2 + b^2\omega_2^2 + \cdots)(A_1 + bA_1' + b^2A_1'' + \cdots)\cos\omega t - 4(a + b\omega_1^2 + \cdots)(bA_2' + \cdots)\cos 2\omega t$$
$$- \cdots + a[(bc' + b^2c'' + \cdots) + (A_1 + bA_1' + \cdots)\cos\omega t + \cdots]$$
$$= -b(\mathfrak{C}^2 + \tfrac{1}{2}\mathfrak{a}_1^2(1 + \cos 2\omega t) + \tfrac{1}{2}\mathfrak{a}_2^2(1 + \cos 4\omega t) + \cdots + 2\mathfrak{C}\mathfrak{a}_1\cos\omega t +$$
$$+ 2\mathfrak{C}\mathfrak{a}_2\cos 2\omega t + \cdots + \tfrac{1}{2}\cdot 2\mathfrak{a}_1\mathfrak{a}_2(\cos\omega t + \cos 3\omega t) + \cdots)$$

常数項

$$a[bc' + b^2c'' + \cdots] = -b[(b^2c'^2 + 2b^3c'c'' + \cdots) + \tfrac{1}{2}(A_1^2 + 2bA_1A_1' + \cdots) + \frac{\mathfrak{a}_2^2}{2} + \cdots]$$

b :　$c' = -\dfrac{A^2}{2a}$

$c'' = \dfrac{-AA_1'}{a} = \dfrac{-A^3}{3a^2}$　etc.

（A_1, A_1' …には初期條件から求まったものを代入後に出てくる）

$\cos\omega t$ の係数

$$-(a + b\omega_1^2 + b^2\omega_2^2 + \cdots)(A_1 + bA_1' + b^2A_1'' + \cdots) + a(A_1 + bA_1' + \cdots)$$
$$= -b[(\underbrace{bc'A_1 + b^2(c''A_1 + c'A_1') + \cdots}_{2\times\ 2\mathfrak{C}\mathfrak{a}_1}) + (\underbrace{bA_1A_2' + b^2(A_1'A_2' + A_1A_2'') + \cdots}_{\mathfrak{a}_1\mathfrak{a}_2}) + \mathfrak{a}_2\mathfrak{a}_3 + \cdots$$

b :　$\omega_1^2 = 0$

b^2 :　$\omega_2^2 = -\dfrac{5}{6}\dfrac{A^2}{a}$

量子力学
(行列方程式)

量子條件　$\oint p\,dx = nh$　or　$px - xp = -i\hbar$

$$(n|y|m) = (bc'(n) + b^2c''(n) + \cdots)\delta_{mn} \qquad (n \geqq m)$$
$$+ (A_1(n) + bA_1'(n) + b^2A_1''(n) + \cdots)e^{i\omega_{nn-1}t}\delta_{mn-1}$$
$$+ (bA_2'(n) + b^2A_2''(n) + \cdots)e^{i\omega_{nn-2}t}\delta_{mn-2}$$
$$+ (b^2A_3''(n) + \cdots)e^{i\omega_{nn-3}}\delta_{mn-3} + \cdots$$
$$= \mathfrak{C}(n)\delta_{mn} + \mathfrak{a}_1(n)e^{i\omega_{nn-1}t}\delta_{mn-1} + \cdots$$

（y はエルミート行列 故 $n<m$ も分る）

$$\omega_{nn-1}^2 = a + b\omega_1(n)^2 + b^2\omega_2(n)^2 + \cdots$$

$(n|\ddot{y} + ay + by^2|m) = 0$ は

$$-(a + b\omega_1^2(n) + \cdots)(A_1(n) + bA_1'(n) + b^2A_1''(n) + \cdots)e^{i\omega_{nn-1}t}\delta_{mn-1}$$
$$- \omega_{nn-2}^2(bA_2'(n) + b^2A_2''(n) + \cdots)e^{i\omega_{nn-2}t}\delta_{mn-2} - \cdots$$
$$+ a[(bc'(n) + b^2c''(n) + \cdots)\delta_{mn} + (A_1(n) + bA_1'(n) + b^2A_1''(n) + \cdots)e^{i\omega_{nn-1}t}\delta_{mn-1} + \cdots]$$
$$= -b[\{\mathfrak{C}(n)^2 + \mathfrak{a}_1^2(n+1) + \mathfrak{a}_1^2(n) + \mathfrak{a}_2^2(n+2) + \mathfrak{a}_2^2(n) + \cdots\}\delta_{mn} +$$
$$+ \{(n|\mathfrak{C}\mathfrak{a}_1 + \mathfrak{a}_1\mathfrak{C}|n-1) + (n|\mathfrak{a}_1\mathfrak{a}_2 + \mathfrak{a}_2\mathfrak{a}_1|n-1) + \cdots\}e^{i\omega_{nn-1}t}\delta_{mn-1}$$
$$+ \{(n|\mathfrak{C}\mathfrak{a}_2 + \mathfrak{a}_2\mathfrak{C}|n-2) + (n|\mathfrak{a}_1\mathfrak{a}_1|n-2) + \cdots\}e^{i\omega_{nn-2}t}\delta_{mn-2}$$
$$+ \{(n|\mathfrak{C}\mathfrak{a}_3 + \mathfrak{a}_3\mathfrak{C}|n-3) + (n|\mathfrak{a}_1\mathfrak{a}_2 + \mathfrak{a}_2\mathfrak{a}_1|n-3) + \cdots\}e^{i\omega_{nn-3}t}\delta_{mn-3}$$
$$+ \cdots]$$

$(n|\ |n)$:　（δ_{mn} の係数）

b :　$ac'(n) = -A_1(n+1)^2 - A_1(n)^2 \longrightarrow c'(n) = -\dfrac{\alpha^2(2n+1)}{a}$

b^2 :　$ac''(n) = -(A_1(n)A_1'(n) + A_1'(n)A_1(n) + A_1(n+1)A_1'(n+1) + A_1'(n+1)A_1(n+1))$　　$c''(n) = 0$

$(n|\ |n-1)$

b :　$\omega_1^2 = 0$

b^2 :　$\omega_2^2 = -\dfrac{10}{3}\alpha^2 n$

c041-020-010

$\cos 2\omega t$ の係数

$$-4(a+b\omega_1^2+b\omega_2^2+\cdots)\mathfrak{a}_2+a\mathfrak{a}_2=-b\left[2(b^2c'A_2'+\cdots)+\frac{1}{2}(A_1^2+2bA_1A_1'+\cdots)+\cdots\right]$$

b: $\quad A_2'=\dfrac{A^2}{6a}$

b^2: $\quad A_2''=\dfrac{A^3}{9a^2}$ $\quad$ etc.

$\cos 3\omega t$:

$$-9(a+b\omega_1^2+\cdots)\mathfrak{a}_3+a\mathfrak{a}_3=-b\left[2(b^2c'A_3'+\overset{c\mathfrak{a}_3}{\cdots})+(bA_1A_2'+\overset{\mathfrak{a}_1\mathfrak{a}_2}{\cdots})+\cdots\right]$$

b: $\quad A_3'=0$

b^2: $\quad A_3''=\dfrac{1}{48}\dfrac{A^3}{a^2}$ $\quad$ etc.

初期条件より

$$A_1+b(c'+A_1'+A_2')+b^2(c''+A_1''+A_2''+A_3'')+\cdots=A$$

b^0: $\quad A_1=A$

b: $\quad A_1'=\dfrac{A^2}{3a}$

b^2: $\quad A_1''=\dfrac{29}{144}\dfrac{A^3}{a^2}$

$(n|\ |n-2)$

b: $\quad A_2'(n)=-\dfrac{\alpha^2}{3a}\sqrt{n(n-1)}$

b^2: $\quad A_2''(n)=0$

注意 $\quad \omega_{nn-2}^2=(\omega_{nn-1}+\omega_{n-1\,n-2})^2$

$$=\left[a^{\frac{1}{2}}\left(1-\frac{b^2}{2}\frac{10}{3}\alpha^2 n\right)+a^{\frac{1}{2}}\left(1-\frac{b^2}{2}\frac{10}{3}\alpha^2(n-1)\right)\right]^2$$

$$=4a\left(1-b^2\frac{10}{3}\alpha^2\left(n-\frac{1}{2}\right)\right) \qquad (b^2\text{まで})$$

$(n|\ |n-3)$

b^2: $\quad A_3''(n)=\dfrac{1}{12}\dfrac{\alpha^3}{a^2}\sqrt{n(n-1)(n-2)}$

量子条件より

$$\frac{\hbar}{2mi}n=-i\sqrt{a}\left(1+\frac{1}{2}\frac{b}{a}\omega_1^2+\frac{b^2}{2}\left(\frac{\omega_2^2}{a}-\frac{\omega_1^4}{4a^2}\right)+\cdots\right)\mathfrak{a}_1(n)^2-i\cdot 2\omega_{nn-2}\mathfrak{a}_2(n)^2$$
$$-i\cdot 3\omega_{nn-3}\mathfrak{a}_3^2(n)+\cdots$$

(c.f. 朝永「量子力学 I」 P.252)

b^0: $\quad A_1(n)=\alpha\sqrt{n}$ $\qquad \alpha\equiv\dfrac{\hbar}{2m\sqrt{a}}$

b': $\quad A_1'(n)=0$

b^2: $\quad A_1''(n)=\dfrac{\alpha^3}{18a^2}\sqrt{n}\,(19n-4)$

（$A_1, A_1', A_1''\cdots$ 及び $A_1(n), A_1'(n), A_1''(n)\cdots$ は夫々の運動方程式からでなく、この様にしてきまることと、初期条件と量子条件が対応していることに注意.）

解. $\qquad \dfrac{bA}{a}\equiv\varepsilon$ $\qquad \varepsilon^2$までとる

$$y=-\left(\frac{\varepsilon}{2}A+\frac{\varepsilon^2}{3}\right)$$
$$+\left(A+\frac{\varepsilon}{3}A+\frac{29}{144}\varepsilon^2A\right)\cos\omega t$$
$$+\left(\frac{\varepsilon}{6}A+\frac{\varepsilon^2}{9}A\right)\cos 2\omega t$$
$$+\frac{\varepsilon^2}{48}A\cos 3\omega t$$

$$\omega=\sqrt{a}\left(1-\frac{5}{12}\varepsilon^2\right)$$

解 $\qquad \dfrac{b\alpha}{a}\equiv\varepsilon$

$$(n|y|n)=-2\alpha\varepsilon\left(n+\frac{1}{2}\right)(1+\cdots)$$
$$(n|y|n-1)=\alpha\sqrt{n}\left(1+\frac{1}{18}\varepsilon^2(19n-4)+\cdots\right)e^{i\omega_{nn-1}t}$$
$$(n|y|n-2)=\frac{\alpha}{3}\varepsilon\sqrt{n(n-1)}\left(1+O(\varepsilon^2)+\cdots\right)e^{i\omega_{nn-2}t}$$
$$(n|y|n-3)=\frac{\alpha}{12}\varepsilon^2\sqrt{n(n-1)(n-2)}\,(1+\cdots)e^{i\omega_{nn-3}t}$$

$$\omega_{nn-1}=a^{\frac{1}{2}}\left(1-\frac{\varepsilon^2}{3}\cdot 5n\right)$$

エネルギー $\qquad a=\omega_0^2$ とかくと

$$\omega_0\hbar\left(n+\frac{1}{2}\right)+\frac{\omega_0\hbar}{18}\varepsilon^2(19n^2+11n+9)+\cdots$$

注意. 近似の仕方を

$$y = y_0 + b y_1 + b^2 y_2 + \cdots$$
$$a = \omega_0^2 + b\omega_1^2 + b\omega_2^2 + \cdots$$

と展開して.

$$(\ddot{y}_0 + b\ddot{y}_1 + b^2\ddot{y}_2 + \cdots) + (\omega_0^2 + b\omega_1^2 + b^2\omega_2^2 + \cdots)(y_0 + by_1 + b^2 y_2 + \cdots)$$
$$= -by_0^2 + 2b^2 y_0 y_1 + b^3(y_1^2 + 2y_0 y_2) + \cdots \quad \text{なる方程式}$$

から. b の order 夫〻よりきめることも出来るが.

解は

$$y = -\left(\frac{bA^2}{2\omega_0^2} + \frac{b^2A^3}{3\omega_0^4}\right) + \left(A + \frac{bA^2}{3\omega_0^2} + \frac{29b^2A^3}{144\omega_0^4}\right)\cos\omega_0 t$$
$$+ \left(\frac{bA^2}{6\omega_0^2} + \frac{b^2A^3}{9\omega_0^4}\right)\cos 2\omega_0 t + \frac{b^2A^3}{48}\cos 3\omega_0 t$$

之は前の解で a の代りに ω_0^2 が来ているだけだが

$$\frac{1}{\omega_0^2} = \frac{1}{a} + \frac{5}{6}\varepsilon^2\frac{1}{a}$$

故、ε^3 の項から喰ちがってくる。与えられたのは a で ω_0^2 でないから
このやり方は悪い近似を与える。. . . by^3 項がは入った時には
$\omega_1^2 \neq 0$ 故 $1/\omega_0^2 = 1/a + (\varepsilon)$ で ε^2 の項から近似が悪くなる。

$$H_{perturb} = \frac{mb}{3}y^3 \equiv H' \quad \text{として.}$$

$$\text{Energy} = (n|H_0|n) + (n|H'|n) + {\sum_k}' \frac{(n|H'|k)(k|H'|n)}{H_n^0 - H_k^0} \quad \text{を計算してみると}$$
$$= \left(n + \frac{1}{2}\right)\omega_0\hbar - \frac{\varepsilon^2}{36}(30n^2 + 30n + 11)\omega_0\hbar$$

2) 非線型方程式に従う行列の形

by^2

$$\begin{array}{c|ccccccc|}
 & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & \\
0 & \varepsilon & 1 & \varepsilon & \varepsilon^2 & \varepsilon^3 & \varepsilon^4 & \cdots \\
1 & 1 & \varepsilon & 1 & \varepsilon & \varepsilon^2 & \varepsilon^3 & \cdots \\
2 & \varepsilon & 1 & \varepsilon & 1 & \varepsilon & \varepsilon^2 & \cdots \\
3 & \varepsilon^2 & \varepsilon & 1 & \varepsilon & 1 & \varepsilon & \cdots \\
4 & \varepsilon^3 & \varepsilon^2 & \varepsilon & 1 & \varepsilon & 1 & \cdots \\
 & \varepsilon^4 & \varepsilon^3 & \varepsilon^2 & \varepsilon & 1 & \varepsilon & \cdots \\
 & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots
\end{array}$$

二乗

$$\begin{array}{|ccccccc|}
0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & \\
1 & \varepsilon & 1 & \varepsilon & \varepsilon^2 & \varepsilon^3 & \cdots \\
\varepsilon & 1 & \varepsilon & 1 & \varepsilon & \varepsilon^2 & \cdots \\
1 & \varepsilon & 1 & \varepsilon & 1 & \varepsilon & \cdots \\
\varepsilon & 1 & \varepsilon & 1 & \varepsilon & 1 & \cdots \\
\varepsilon^2 & \varepsilon & 1 & \varepsilon & 1 & \varepsilon & \cdots \\
\varepsilon^3 & \varepsilon^2 & \varepsilon & 1 & \varepsilon & 1 & \cdots \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots &
\end{array}$$

by^3

$$\begin{array}{c|ccccccccc|}
 & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & \\
0 & 0 & 1 & 0 & \varepsilon & 0 & \varepsilon^2 & 0 & \varepsilon^3 & \cdots \\
1 & 1 & 0 & 1 & 0 & \varepsilon & 0 & \varepsilon^2 & 0 & \cdots \\
2 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & \varepsilon & 0 & \varepsilon^2 & \cdots \\
3 & \varepsilon & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & \varepsilon & 0 & \cdots \\
4 & 0 & \varepsilon & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & \varepsilon & \cdots \\
5 & \varepsilon^2 & 0 & \varepsilon & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & \cdots \\
6 & 0 & \varepsilon^2 & 0 & \varepsilon & 0 & 1 & 0 & 1 & \cdots \\
7 & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots &
\end{array}$$

二乗

$$\begin{array}{c|ccccccccc|}
 & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & \\
0 & 1 & 0 & 1 & 0 & \varepsilon & 0 & \varepsilon^2 & 0 & \cdots \\
1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & \varepsilon & 0 & \varepsilon^2 & \cdots \\
2 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & \varepsilon & 0 & \cdots \\
3 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & \varepsilon & \cdots \\
4 & \varepsilon & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & \cdots \\
5 & 0 & \varepsilon & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & \cdots \\
6 & \varepsilon^2 & 0 & \varepsilon & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & \cdots \\
7 & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots &
\end{array}$$

3乗

	0	1	2	3	4	5	6	7	
0	0	1	0	1	0	ε	0	ε^2	‥
1	1	0	1	0	1	0	ε	0	‥
2	0	1	0	1	0	1	0	ε	‥
3	1	0	1	0	1	0	1	0	‥
4	0	1	0	1	0	1	0	1	‥
5	ε	0	1	0	1	0	1	0	‥
6	:	:	:	:	:	:	:	:	

by^4

0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	
ε	1	ε	ε^2	ε	ε^2	ε^3	ε^2	ε^3	ε^6	ε^3	ε^4	ε^5	ε^4	ε^5	‥
.	.	.													

$$b(9|y^4|0) = b\,(\underset{\varepsilon}{9}|\underset{\varepsilon^2}{y}|12)(12|\underset{\varepsilon}{y}|8)(8|\underset{\varepsilon}{y}|4)(4|\underset{\varepsilon}{y}|0)$$

by^5

0	1	0	ε	0	ε	0	ε^2	0	ε^2	0	ε^3	0	ε^3	0	ε^4

一般に奇数巾の非線型項の場合　　diagonal element はない。

例えば by^3:　　bの0次で　$n \longrightarrow \begin{matrix} n+1 \\ n-1 \end{matrix}$

bの1次で　$n \longrightarrow \begin{matrix} n+1 \\ n-1 \end{matrix}$ と $n \longrightarrow \begin{matrix} n+3 \\ n-3 \end{matrix}$

でいくら組合せても（三段飛という條件の下に）　" "　$n \longrightarrow \begin{matrix} n+1 \\ n-1 \end{matrix}$, $\begin{matrix} n+3 \\ n-3 \end{matrix}$, $\begin{matrix} n+5 \\ n-5 \end{matrix}$, etc.

そのわけは　「奇数を奇数回加えても偶数にはならない」からである。

偶数巾の場合は　ε の order で diag. element がある。

之は古典論でいへば、diag. element は常数項に対応し、この常数項が出てくるのは、力が原点 ($y=0$) に対して対称でないからである。