研究内容紹介

# Shooting Method

## 1. 原理

境界値問題を数値的に解く解法の 1 つに **Shooting Method** が挙げられる。ShootingMethod では固有値の値を適当に決めることで、方程式系を初期値問題に還元し解く方法である。

## 2. 導入

ShootingMethod を導入し、1 次元シュレディンガー方程式を数値的に解くことを考えよう。

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + k(x)^2 f = 0 \tag{1}$$

$$k(x)^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\Big(E - V(x)\Big)$$
$$= E^* - V^* \tag{2}$$

ここで、$f$ が波動関数、$V(x)$ がポテンシャル、$E$ がエネルギーを、$\hbar$ がプランク定数 $h$ を $2\pi$ で割ったもの、$m$ が電子の質量をそれぞれ表している。ここでは、簡単のためにポテンシャル $V(x)$ を次のように設定する。

$$V(x) = \infty \quad (x < 0, x > L) \tag{3}$$

$$V(x) = 0 \quad (0 < x < L) \tag{4}$$

ここで $L$ はポテンシャルの井戸の幅を表している。また、境界条件は $f(0) = f(L) = 0$ とする。

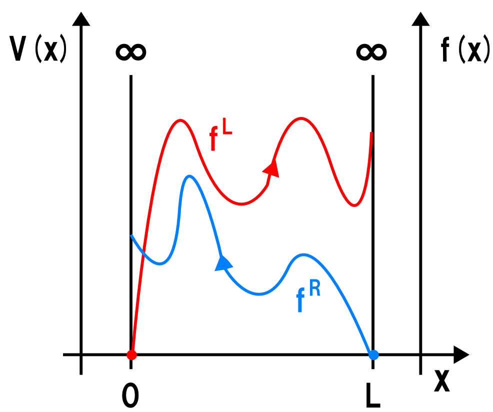


Fig. 1　ポテンシャルの井戸

(1) 式を 2 次の精度で差分化し、適当な固有値 $E^*$ を決め両端から値を計算していく (またこのとき $f_1^L$ と $f_{\mathrm{imx}-1}^R$ は適当な値を選ぶ)。

$$f_{j+1}^L = (2 - k_j^2 \Delta x^2) f_j^L - f_{j-1}^L \tag{5}$$

$$f_{j-1}^R = (2 - k_j^2 \Delta x^2) f_j^R - f_{j+1}^R \tag{6}$$

一般的には、左側から求めた解 $f_j^L$ と右側から求めた解 $f_j^R$ は同値にはならないが、真の解ならば、$f_j^L$ と $f_j^R$ は同値にならなければならない。すなわち

$$f_j^L = f_j^R \quad (j = 0 \sim \mathrm{imx}) \tag{7}$$

を満たすはずである。ここで、imx は格子点の最大数である。上式が満たされなければ、固有値 $E^*$ を少しずつ変え、最適な $E^*$ を求める。

## 3. シミュレーション結果

結果は $L = 50.0$、imx $= 50$、$dx = 1.0$ とした時のものである。また、初期の $E^*$ は $E^* = 0$ とした。

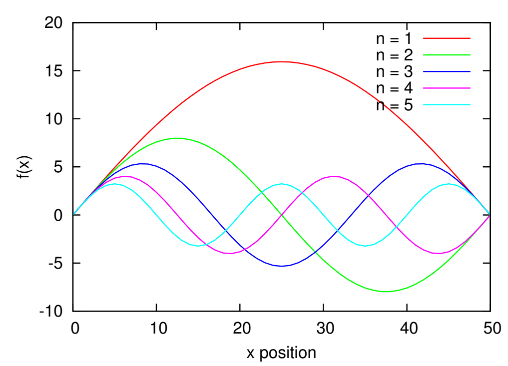


Fig. 2　各 n における波動関数

Tab.1　エネルギー準位 $E_n^*$

| n | 理論値 ${E^*}_n^T$ | 計算値 ${E^*}_n^S$ |
|---|---|---|
| 1 | $3.95 \times 10^{-3}$ | $3.95 \times 10^{-3}$ |
| 2 | $1.58 \times 10^{-2}$ | $1.58 \times 10^{-2}$ |
| 3 | $3.55 \times 10^{-2}$ | $3.54 \times 10^{-2}$ |
| 4 | $6.32 \times 10^{-2}$ | $6.28 \times 10^{-2}$ |
| 5 | $9.87 \times 10^{-2}$ | $9.79 \times 10^{-2}$ |

解析的に得られた結果と数値的に得られた結果はよく一致した。