FlexPDE v7 Trial Script [D]

本トライアルではポテンシャルの井戸に束縛された形の電子の挙動を記述する**シュレディンガー方程式**にFlexPDE を適用し、その**波動関数**の形状を分析してみます。

1 問題設定

想定するポテンシャル障壁としては図 1 のようなものを考えます。解析対象ドメインとしては $-L_x \le x \le L_x$ の範囲の 1 次元領域を考えるわけですが、その中で $-d/2 \le x \le d/2$ の範囲においてはポテンシャルは 0、それ以外の領域においてはポテンシャルが $V_0(> 0)$ であるとします。

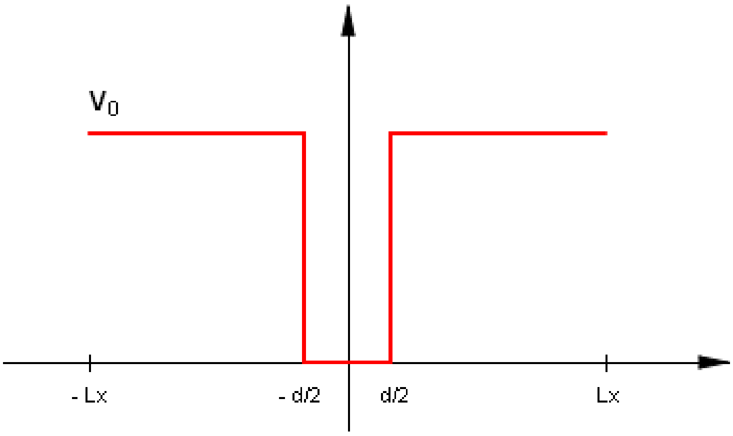


図 1 ポテンシャルの井戸

粒子の持つエネルギーが小さい場合、古典力学では粒子の存在は $-d/2 \le x \le d/2$ の範囲に限られることになるわけですが、シュレディンガー方程式によって記述される粒子の場合には、その存在確率は井戸の外側であっても 0 にはなりません。その点を FlexPDE を用いて確認してみます。

© Copyright Math 工房

2 シュレディンガー方程式

量子力学において質量 m の粒子の運動は次に示すような**シュレディンガー方程式**によって記述されます。

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\nabla^2\Psi(\boldsymbol{r},t)+V(\boldsymbol{r})\Psi(\boldsymbol{r},t)=-\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial\,\Psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} \tag{1}$$

ここに $\Psi(\boldsymbol{r},t)$ は波動関数を表し、その絶対値の 2 乗 $|\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2$ は空間位置 $\boldsymbol{r}$ の近傍にその粒子を見出す確率を意味することになります。なお、$V(\boldsymbol{r})$ は位置エネルギー、h はプランク定数、i は虚数単位を表します。今、

$$\Psi(\boldsymbol{r},t)=\psi(\boldsymbol{r})\phi(t) \tag{2}$$

のように変数分離された解を仮定するなら (1) 式は

$$\frac{1}{\psi(\boldsymbol{r})}\left\{-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r})+V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\right\}=-\frac{1}{\phi(t)}\frac{h}{2\pi i}\frac{d\phi(t)}{dt} \tag{3}$$

のように変形できます。この場合、左辺は $\boldsymbol{r}$ のみに、右辺は t のみに依存した形になっているため、両辺の値は定数でなくてはなりません。ここではその定数値を W と表現することにします。

右辺については単純に積分を行うことによって

$$\phi(t)=C\exp\left(-2\pi i\frac{W}{h}t\right)\qquad C:\ \text{積分定数} \tag{4}$$

という式が導かれます。一方、左辺を書き直すと

$$\nabla^2\psi(\boldsymbol{r})-\frac{8\pi^2 m}{h^2}V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})+\frac{8\pi^2 m}{h^2}W\psi(\boldsymbol{r})=0 \tag{5}$$

のようになります。$V(\boldsymbol{r})$ と W は同じような形で数式に入り込んでいるため、W の方もエネルギーに相当する量を表すことがわかります。

図 1 に示した問題の場合、系は 1 次元であるため、$\psi(\boldsymbol{r})$ は $\psi(x)$ と書くことができます。$\psi(x)$ は $\phi(t)$ と同様、一般的には複素関数としての扱いが必要となるのですが、ここで扱うような単純な境界条件の場合には実関数としての扱いで求解を行うことが可能です。

> 複素関数としての扱いが必要となる用例については
>
> `http://www.math-koubou.jp/pde12.html`
>
> に記載されているサンプルスクリプト集をご参照ください。

また方程式 (5) は W が特定の値のときに non-trivial な解を持つことになることから、*Trial C* の場合と同様、FlexPDE の固有値解法（モード解析）の機能を用いて求解を行うことになります。

3 スクリプト

ここでは次のようなスクリプト `trial7d.pde` を用意します。

```
TITLE
    'Particle in a Potential Well'

SELECT
    Errlim = 1e-4
    Modes = 5

COORDINATES
    Cartesian1

VARIABLES
    psi

DEFINITIONS                              { SI units throughout }
    Lx = 3e-9 d = 1e-9
    me = 9.1096e-31                      { Electron mass }
    h = 6.6262e-34                       { Planck's constant }
    c = 8*pi^2*me/h^2                    { Coefficient for PDE }
    V0 = 2e-18  V                        { Potential energy }
    int_psi2 = integral(psi^2)           { Integral in 1D }
    psi1 = psi/sqrt(int_psi2)            { Normalized wave function }
    well1 = V/V0*globalmax(psi1^2)       { For plot only }

EQUATIONS
    dxx(psi) - c*V*psi + lambda*c*psi = 0

BOUNDARIES
    Region 'domain' V = V0
        Start (-Lx) Point value(psi) = 0
        Line to (Lx) Point value(psi) = 0
    Region 'well' V = 0
        Start (-d/2) Line to (d/2)

PLOTS
    Elevation (psi1^2, well1) from (-1.5*d/2) to (1.5*d/2)

END
```

セクションごとに説明を補足しておくと次のようになります。

(1) SELECT **セクション**

SELECT セクションでは FlexPDE 実行にかかわる様々なオプションを指定することができます。Errlim というのは演算精度に関するオプションで、許容される相対演算誤差の大きさを規定します。デフォルト値は 0.002 ですが、ここでは 0.0001 という形でより高い精度を要求しています。**一方、**Modes $= n$ というステートメントはモード解析、すなわち固有値解法機能の使用を指示するものです。この場合、n としては 5 という値を指定しているので、小さい方から 5 個の固有値が特定され、それに対応した解 $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_5$ が算出されることになります。

(2) COORDINATES **セクション**

COORDINATES セクションでは使用する座標系を指定します。デフォルトでは 2 次元直交座標系が仮定され、$z = f(x, y)$ という形の関数値が x-y 平面内で規定されたドメイン上で計算されることになります。しかしここで対象とする問題の場合には $y = \psi(x)$ という関数値の算出が目的となるため、座標系としては 1 次元直交座標系であることを明示する必要があるわけです。

(3) VARIABLES **セクション**

VARIABLES セクションでは従属変数が ψ である旨を指定します。

(4) DEFINITIONS **セクション**

DEFINITIONS セクションではスクリプト中で使用するパラメータを定義します。

- 井戸の幅である d の値としては $10^{-9}m$ を仮定し、解析対象のドメイン長である $2L_x$ の値としては d の 6 倍の大きさを設定しています。ドメインの両端 $(x = \pm L_x)$ においては粒子の存在確率が 0、すなわち $\psi = 0$ であるという境界条件を後述する BOUNDARIES セクション中で設定することになる点に注意してください。
- 電子の質量 m_e とプランク定数 h の値を SI 単位系で指定します。また方程式 (5) 中に出てくる係数値 $\frac{8\pi^2 m_e}{h^2}$ を c と定義します。
- 方程式 (5) を記述する際必要となるパラメータ名 V を定義します。その値の設定は別途 BOUNDARIES セクション中でリージョンごとに行うことになります。なお、井戸の外側におけるポテンシャルエネルギーの大きさを示す V_0 の値は W の固有値である $W_1 \sim W_5$ と comparable な値に設定されている点に注意してください。$V_0 \gg W_i \, (i = 1, \ldots, 5)$ のように設定した場合には量子論的効果はほとんど検出できなくなります。
- この他に int_psi2, psi1, well1 といったパラメータを定義しているわけですが、これは $|\psi_i^2|$ の波高を示す補助線をプロットする上で利用されるものです。

(5) EQUATIONS **セクション**

EQUATIONS セクションでは方程式 (5) を記述します。なお、W の代りに lambda というパラメータ名が使用されている点に注意してください。これによって W の固有値が $\lambda_i\,(i = 1, \ldots, 5)$ として算出されてくることになります。なお、lambda については予約語なので DEFINITIONS セクション中で定義する必要はありません。

(6) BOUNDARIES **セクション**

BOUNDARIES セクション中では井戸の外側と井戸の内側という 2 つのリージョンを定義し、それごとに V の値を設定します。なお、$x = \pm L_x$ という端点において $\psi = 0$ であるという Dirichlet 型境界条件を同時に指定しているわけですが、1 次元座標系の場合には通常の Value 文ではなく Point value 文が用いられる点に注意してください。

(7) PLOTS **セクション**

PLOTS セクション中では電子の存在確率を示す $|\psi^2|$ の値をプロットするよう指示しています。なお、well1 の値も同時にプロットさせていますが、これはポテンシャル障壁の位置と形状を示すためのものです。また表示範囲を $1.5 \times d$ の範囲に狭めてあるので、井戸の周囲での関数形状の変化がより正確に見て取れるようになります。

4　実行結果

(1) **固有値リスト**

固有値解法の場合、算出された固有値一覧を示す次のような表がグラフに先立ち出力されてきます。

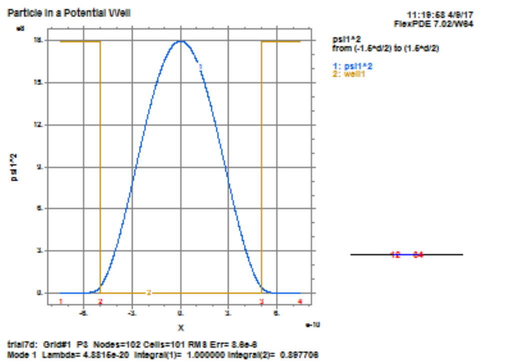
```
Particle in a Potential Well                         11:19:58 4/9/17
                                                       FlexPDE 7.02

  Eigenvalues:

  Mode  1:  4.881499e-20
  Mode  2:  1.947609e-19
  Mode  3:  4.361754e-19
  Mode  4:  7.695770e-19
  Mode  5:  1.187663e-18

trial7d:  Grid#1  P3  Nodes=102 Cells=101  RMS Err= 8.6e-6
```

これらはエネルギー準位を意味する $W_1 \sim W_5$ の値を示すものです。

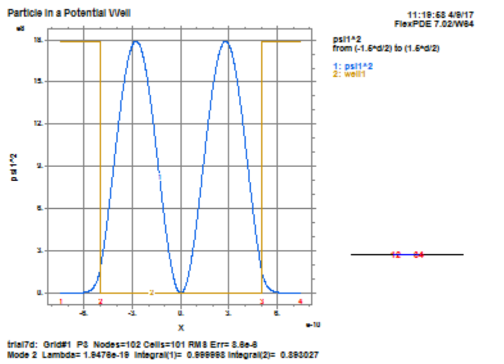
(2) $|\psi_i^2|$ **のプロット**

各モードに対応した $|\psi_i^2|$ の関数形状は次のようになります。

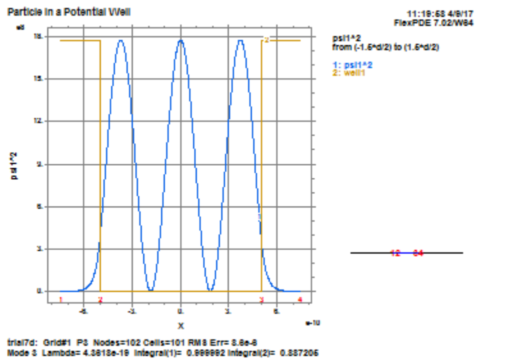
Mode 1



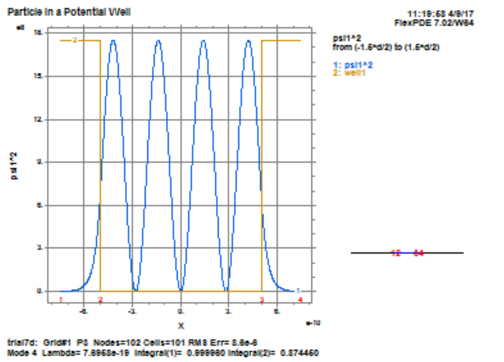
Mode 2



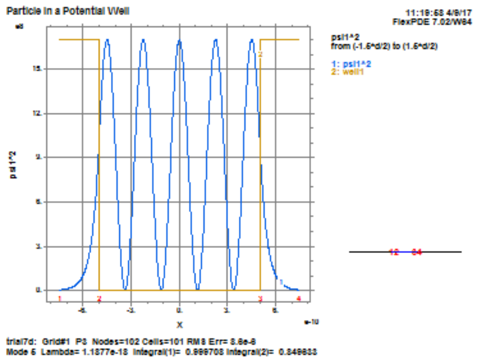
Mode 3



Mode 4



Mode 5



いずれの場合にも井戸の外側における電子の存在確率が 0 ではないことが示されている点に注意してください。 ■