# 微分方程式：時間に依存しないシュレディンガー方程式

$$\boxed{H\Psi = E\Psi}$$

$H$　ハミルトニアン（エネルギー演算子）

$\Psi$　波動関数（「状態」を表す関数）

$|\Psi|^2 d\mathbf{r}$　が状態（電子など）の確率密度を表す

## １次元のシュレディンガー方程式

$$\boxed{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right)\Psi(x)=E\Psi(x)}$$

波動方程式の形

$V(x)$　ポテンシャルエネルギー　⟶　任意の形

原子・分子、結晶、量子ドット、
量子井戸（デバイス）、、、

シュレディンガー方程式が解析的に解ける例は極めて少ない

# 微分方程式：シュレディンガー方程式

## シューティング法による解法

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x)+\left[V(x)-E\right]\Psi(x)=0$$

⇒ $\Psi(x)$ の２階微分を含む

⇒ 有限差分による解法

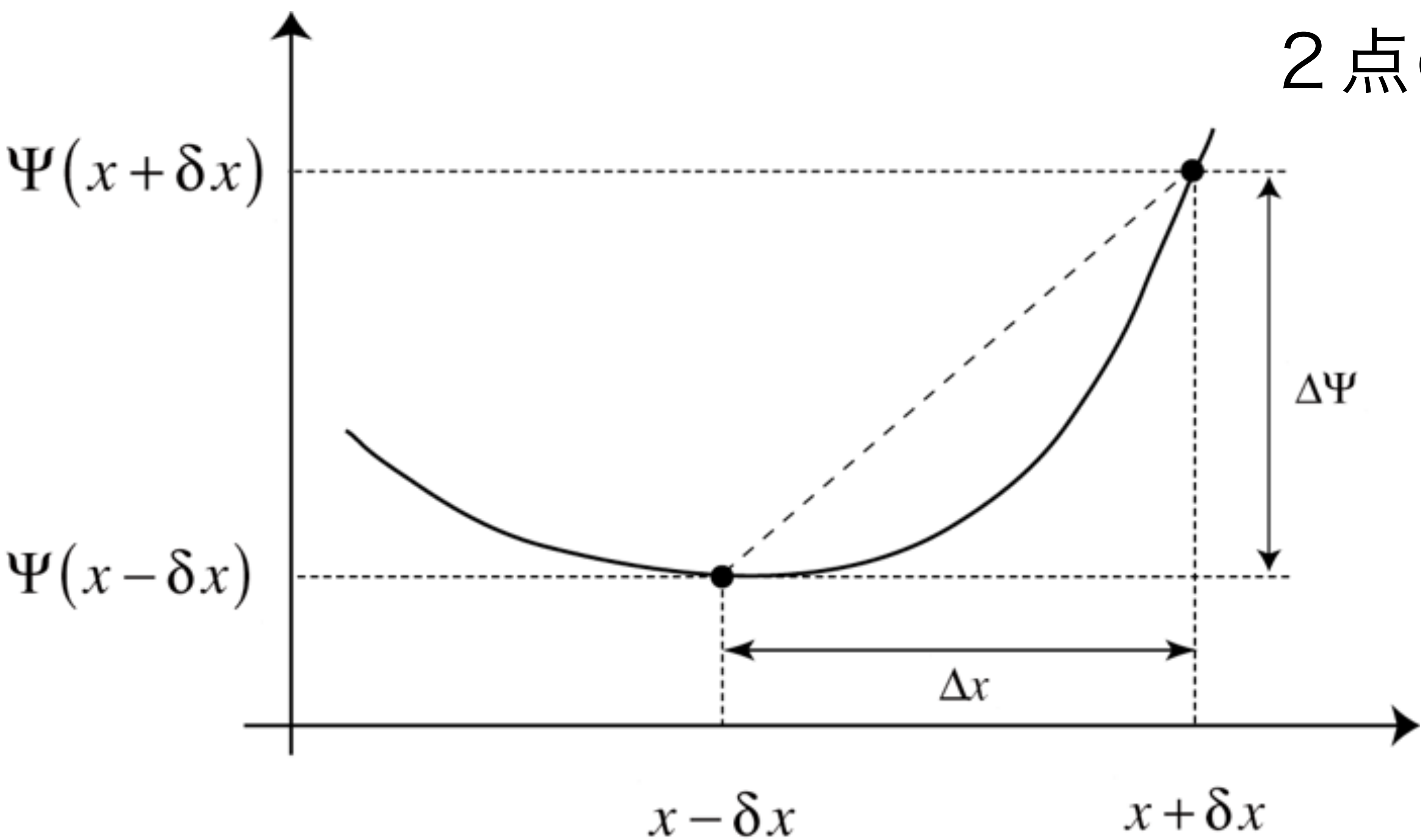
$$\frac{d\Psi}{dx}=\lim_{\Delta x\to 0}\frac{\Delta\Psi}{\Delta x}$$

# 微分方程式：シュレディンガー方程式

## 有限差分による微分の表現

$$\frac{d\Psi}{dx} \simeq \frac{\Delta\Psi}{\Delta x} = \frac{\Psi(x+\delta x) - \Psi(x-\delta x)}{2\delta x} \equiv \Psi'$$

２点の値が必要



# 微分方程式：シュレディンガー方程式

## 有限差分による２階微分の表現

$$\frac{d\Psi'}{dx} \simeq \frac{\Psi'(x+\delta x) - \Psi'(x-\delta x)}{2\delta x}$$

$$\Rightarrow \frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) \simeq \frac{\left.\frac{d\Psi}{dx}\right|_{x+\delta x} - \left.\frac{d\Psi}{dx}\right|_{x-\delta x}}{2\delta x}$$

１階微分の表式を代入

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = \frac{\left\{\frac{\Psi(x+2\delta x)-\Psi(x)}{2\delta x}\right\} - \left\{\frac{\Psi(x)-\Psi(x-2\delta x)}{2\delta x}\right\}}{2\delta x}$$

$$\therefore \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} \simeq \frac{\Psi(x+2\delta x) - 2\Psi(x) + \Psi(x-2\delta x)}{(2\delta x)^2}$$

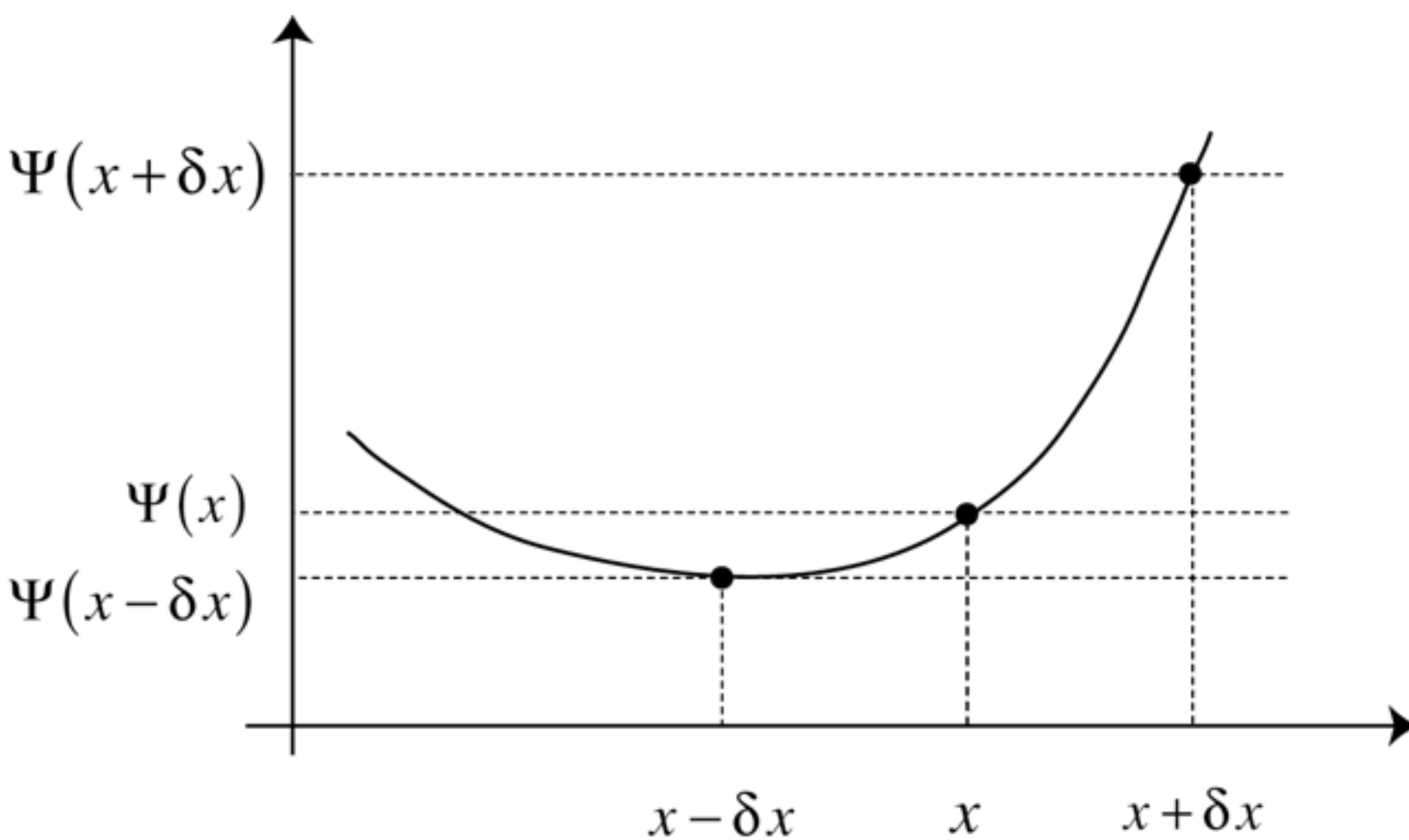
注意：最後の変形は（アルゴリズムを見やすくするために変形したが）
本当はしない方が良い（引き算誤差が増大！）

# 微分方程式：シュレディンガー方程式

## 有限差分による２階微分の表現

$2\delta x \longrightarrow \delta x$ と読み替える（書き直す）と

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} \simeq \frac{\Psi(x+\delta x) - 2\Psi(x) + \Psi(x-\delta x)}{(\delta x)^2}$$




２階微分

３点の値が必要

# 微分方程式：シュレディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x)+\left[V(x)-E\right]\Psi(x)=0$$

$$\Rightarrow\ -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\Psi(x+\delta x)-2\Psi(x)+\Psi(x-\delta x)}{(\delta x)^2}\right]+\left[V(x)-E\right]\Psi(x)=0$$

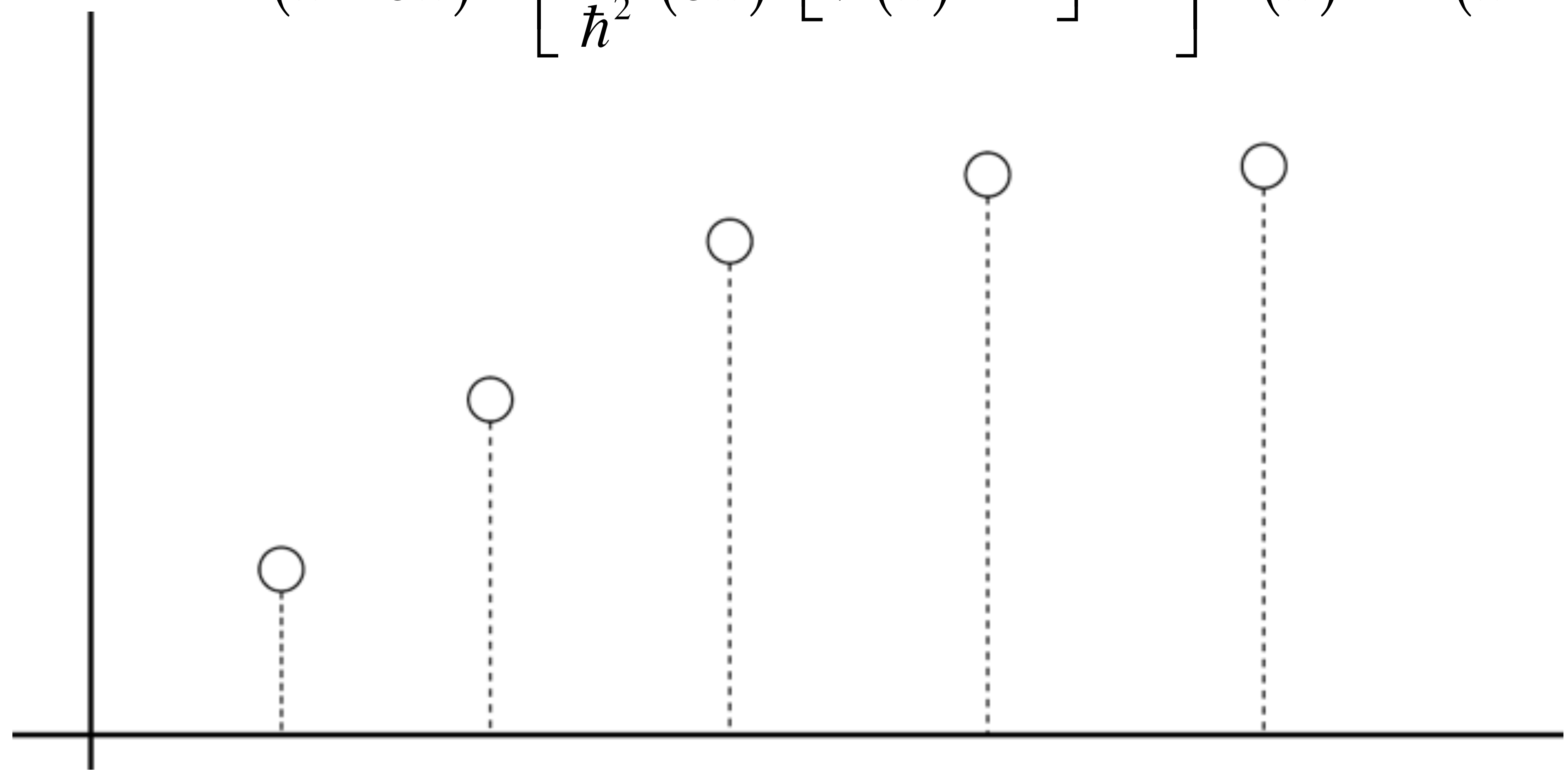
$$\Rightarrow\ \Psi(x+\delta x)-2\Psi(x)+\Psi(x-\delta x)=\frac{2m}{\hbar^2}(\delta x)^2\left[V(x)-E\right]\Psi(x)$$

$$\Rightarrow\ \boxed{\Psi(x+\delta x)=\left[\frac{2m}{\hbar^2}(\delta x)^2\left[V(x)-E\right]+2\right]\Psi(x)-\Psi(x-\delta x)}$$

$\Psi(x-\delta x)$ と $\Psi(x)$ の値を使って $\Psi(x+\delta x)$ の値を求める式になっている

# 微分方程式：シュレディンガー方程式

$$\Psi(x+\delta x)=\left[\frac{2m}{\hbar^2}(\delta x)^2\left[V(x)-E\right]+2\right]\Psi(x)-\Psi(x-\delta x)$$



1回目: given $\Psi^{(1)}(x-\delta x)$, given $\Psi^{(1)}(x)$, unknown $\Psi^{(1)}(x+\delta x)$

given ↓ given ↓

2回目: $\Psi^{(2)}(x-\delta x)$, $\Psi^{(2)}(x)$, unknown $\Psi^{(2)}(x+\delta x)$

given ↓ given ↓

3回目: $\Psi^{(3)}(x-\delta x)$, $\Psi^{(3)}(x)$, unknown $\Psi^{(3)}(x+\delta x)$

「逐次的に」$\Psi(x)$ を求めてゆく

⇩

シューティング法

# 微分方程式：シュレディンガー方程式

束縛状態について解く

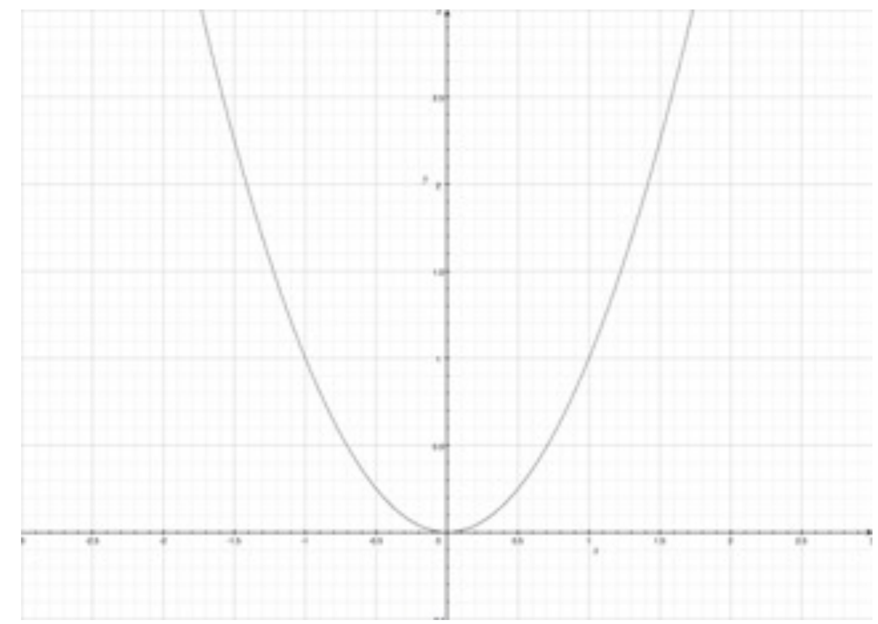
境界条件

固有状態（エネルギー＝E）に対して

$$\begin{cases} \Psi(x,E) \to 0 \\ \dfrac{\partial \Psi(x,E)}{\partial x} \to 0 \end{cases} \quad \text{for} \quad x \to \pm\infty$$

# 微分方程式：シュレディンガー方程式

例：調和型ポテンシャル　$V = cx^2$



$x$に関して対称的

$$V(x) = V(-x)$$

波動関数

$$\Psi(x) = \Psi(-x)$$ symmetric (even parity)

$$\Psi(x) = -\Psi(-x)$$ anti-symmetric (odd parity)

解析解は知られている

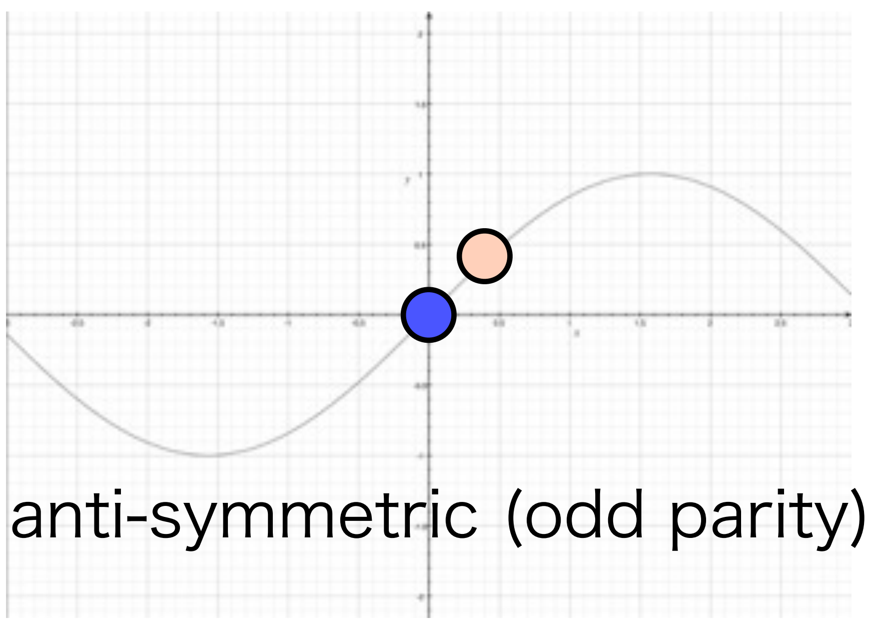
$$\boxed{E_n = \left(n - \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad n = 1, 2, 3, \cdots}$$

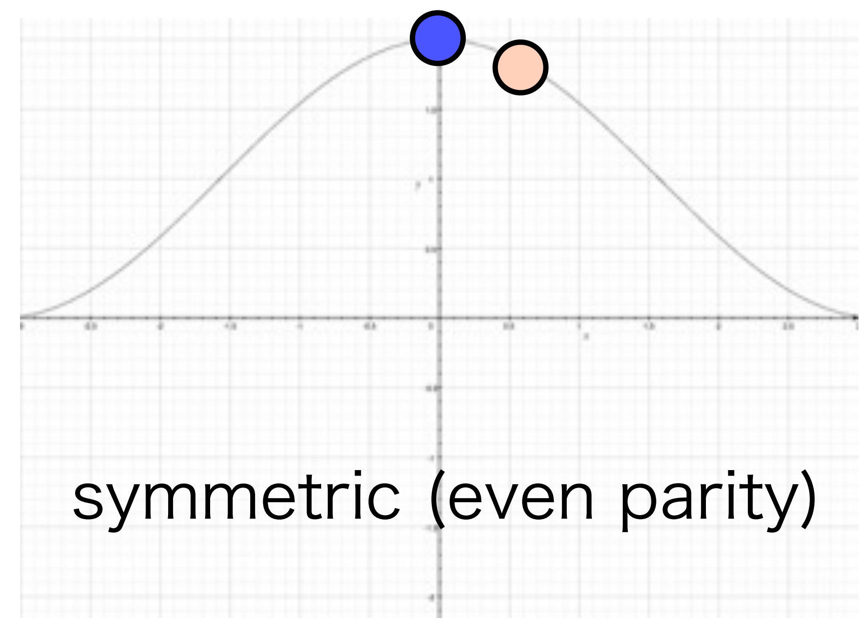
$$\omega = \sqrt{\frac{c}{m}}$$

# 微分方程式：シュレディンガー方程式

シュレディンガー方程式 $\longrightarrow$ 線形

波動関数は定数倍の不定性




1st, 2nd pointの値

- $\Psi(0) = 0$
- $\Psi(0+\delta x) = 1$

1st, 2nd pointの値

- $\Psi(0) = 10$
- $\Psi(0+\delta x) = 9$

1st, 2nd pointの値はどのように設定しても問題なし
最後に規格化（正規化）すればよい

# 微分方程式：シュレディンガー方程式

シューティング法の計算式

$$\Psi(x+\delta x)=\left[\frac{2m}{\hbar^2}(\delta x)^2\left[V(x)-E\right]+2\right]\Psi(x)-\Psi(x-\delta x)$$

１番目、２番目の値を用いて３番目の値を求める式

## Odd parityの場合に解いてみよう

$\Psi(0)=0$　　１番目の値

$\Psi(0+\delta x)=1$　　２番目の値

初期条件

エネルギーＥをいろいろ変えてみて、 $x \to \pm\infty$ で
波動関数がゼロに漸近するものが物理的に意味のあるＥ。

# シュレディンガー方程式 ： 擬似コード

```
define  h_bar, m
define  delta_x, delta_E

  begin do-loop (from E=0 to E=limit)
      psi0 = 0
      psi1 = 1
    begin do-loop (from x=0 to effective_inf)
        calc psi2
        psi0 = psi1
        psi1 = psi2
    end do-loop
      print out ; E, psi2 (psi at inf)
  end do-loop
```

変数、定数の定義

エネルギーのスキャンループ

初期値を代入

座標のスキャンループ

３番目の点（psi2）を計算

波動関数の値を（次の点の計算のために）シフト

実効的な無限大における波動関数の値を出力

# シュレディンガー方程式 ： プログラム例

```
Shooting method program

#define hbar 1.05459e-34    /* プランク定数        */
#define m 9.109534e-31      /* 真空中の電子の質量  */
#define e_0 1.602189e-19  /* 電気素量            */
main()
{
float   dE=1e-3*e_0;        /* エネルギーの増分; dE*/
float   dx=1e-10;               /*座標の有限差分; dx*/
float   E;                              /* the energy E */
float   psi0,psi1,psi2;         /* psi(x-dx), psi(x), and psi(x+dx) */
float   x;                              /* 座標*/

for(E=0;E<e_0;E+=dE)    /*エネルギーを0から変化させる*/
{
    psi0=0;psi1=1;                                  /*波動関数の初期値*/
    for(z=dx;x<100e-10;x+=dx)           /*波動関数を変化させる；初期値x=0+dx*/
   {
        psi2=(2*m*(dx/hbar)*(dx/hbar)*
                 (e_0*(x/100e-10)*(x/100e-10)-E)+2)*psi1-psi0; /*Shooting法でPsi2を求める*/
        psi0=psi1;      /*座標のシフト; */
        psi1=psi2;
   }
    printf("E=%fmeV psi(infty)=%f¥n",E/(1e-3*e_0),psi2);  /*結果の出力meV単位*/
}

}
```

1 meV

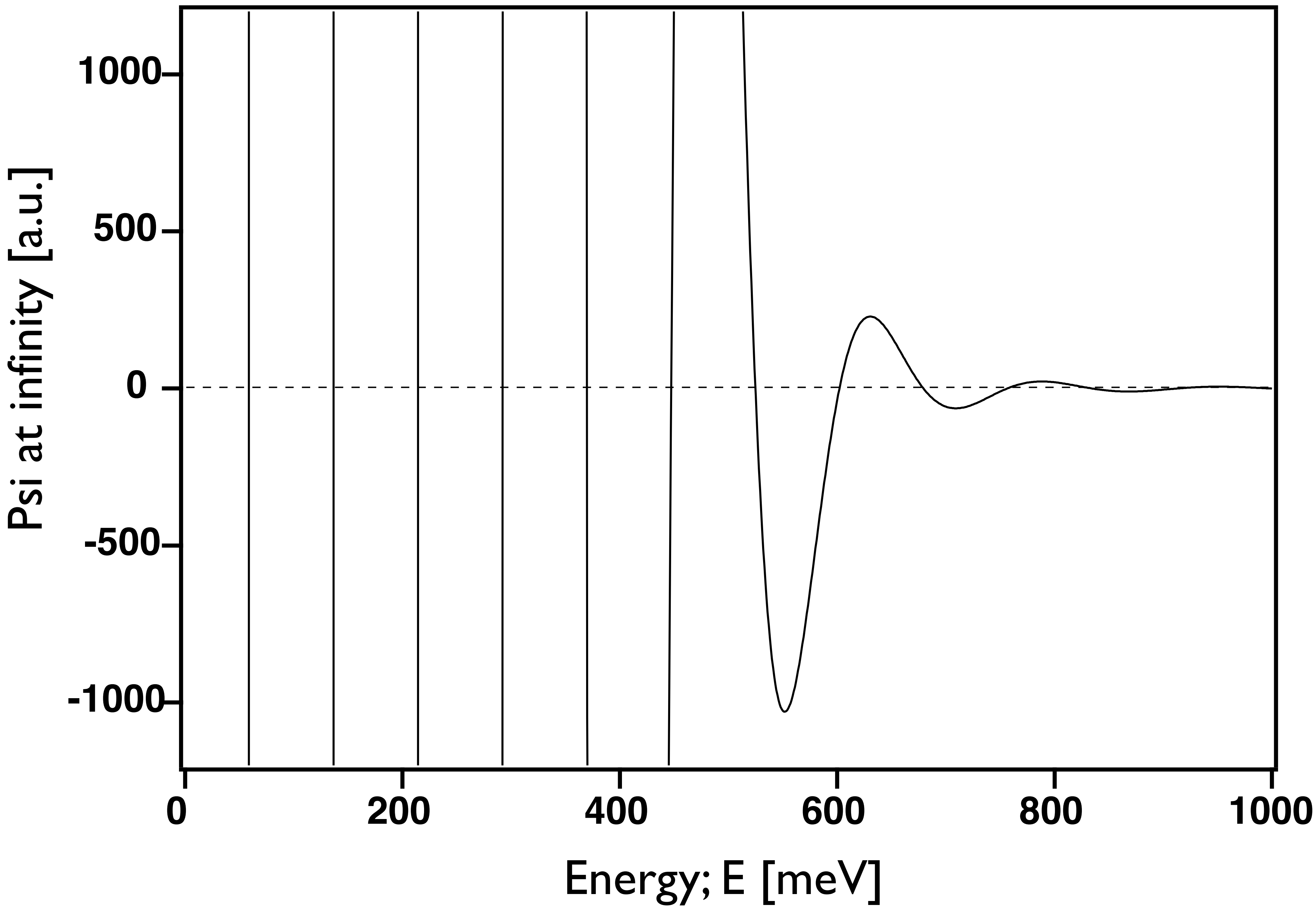
1 Å

エネルギースキャンの上限＝1 eV

座標スキャンの上限＝100 Å

$$V = \left( \frac{x}{100\,\text{Å}} \right)^2 \text{eV}$$

# シュレディンガー方程式 ： 計算結果




Energy s.t. psi@infinity=0 [meV] : 58.5, 136.5, 214.5, 292.5, 369.5, 447.5, 524.5, 602.5, 679.5, 756.5

E_n/(n-1/2) [meV] : 39.0, 39.0, 39.0, 39.0, 38.9, 38.9, 38.9, 38.9, 38.8, 38.8

解析的には39.039

# レポートNo.4　Report No.4

**Deadline 18 August**
**W2-1F Report Box**

任意の境界条件（束縛状態）を設定し、シュレディンガー方程式を数値的に解け。

Set an arbitrary boundary condition (Bound state) you'd prefer to evaluate.
Then, solve the Schrödinger equation numerically
using the Shooting Method (see documents distributed)

1. Energy Eigenvalues
2. Wave Functions (Eigen functions)
3. and more

**提出は任意**
**Optional**

e.g. Spherical Quantum Dots of Si in the $SiO_2$ matrix

e.g. Bound states in the 1D quantum well in an external electrostatic field