

## 4 1次元の量子力学 (高野 宏)

この課題では、量子力学の簡単な例題として、ポテンシャル中を運動する1次元1粒子系に対するシュレーディンガー方程式を数値的に解く。特に、ポテンシャルによる波束の散乱の問題を考える。これにより、量子力学の理解を深めるとともに、偏微分方程式の数値解法の例について学ぶ。

### 4.1 量子力学の復習

#### 4.1.1 シュレーディンガー方程式

量子力学においては、1粒子系の状態は波動関数  $\Psi(\mathbf{x}, t)$  によって記述される。波動関数  $\Psi(\mathbf{x}, t)$  は、位置座標  $\mathbf{x}$ 、時刻  $t$  の関数で、複素数値をとる。この波動関数の時間発展は、時間を含むシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}, t) = H \Psi(\mathbf{x}, t)$$

によって与えられる。ここで、 $H$  は系のハミルトニアンを表す演算子で、古典的ハミルトニアンで運動量  $\mathbf{p}$  を演算子  $\frac{\hbar}{i} \nabla$  で置き換えることによって与えられる。ポテンシャル  $V(\mathbf{x})$  中の質量  $m$  の1粒子の場合、

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x})$$

となり、時間を含むシュレーディンガー方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}, t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}) \right] \Psi(\mathbf{x}, t)$$

となる。この方程式は、

- (1)  $\Psi$  について線型であり、解の重ね合わせができる。
- (2)  $t$  について1階の方程式であり、ある時刻の波動関数が与えられれば、後の時刻の波動関数が決まる。

という特徴をもっている。

時刻  $t$  に粒子の位置測定を行なった時に、 $\mathbf{x}$  付近の微小体積  $d\mathbf{x}$  に粒子を見いだす確率は  $|\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x}$  に比例する。また、古典力学で運動量  $\mathbf{p}$  と位置座標  $\mathbf{x}$  の関数として表された物理量  $O(\mathbf{p}, \mathbf{x})$  を波動関数  $\Psi(\mathbf{x}, t)$  で表される状態に対して測定したときの期待値  $\langle O(\mathbf{p}, \mathbf{x}) \rangle$  は、運動量  $\mathbf{p}$  を演算子  $\frac{\hbar}{i} \nabla$  で置き換えて得られる演算子  $O\left(\frac{\hbar}{i} \nabla, \mathbf{x}\right)$  を用いて、

$$\iiint \Psi^*(\mathbf{x}, t) O\left(\frac{\hbar}{i} \nabla, \mathbf{x}\right) \Psi(\mathbf{x}, t) d^3\mathbf{x}$$

で与えられる。

時間を含むシュレーディンガー方程式を変数分離することにより、 $|\Psi(\mathbf{x}, t)|^2$  が時間に依存しない状態、定常状態の波動関数

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \phi(\mathbf{x}) \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)$$

に対する方程式

$$H\phi(\mathbf{x}) = E\phi(\mathbf{x})$$

が得られる。これを、時間を含まないシュレーディンガー方程式という。

1次元系でポテンシャル  $V(x)$  中の質量  $m$  の1粒子の場合、

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

となり、時間を含むシュレーディンガー方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \Psi(x, t)$$

となる。

時刻  $t$  に粒子を  $x \sim x + dx$  に見いだす確率は  $|\Psi(x, t)|^2 dx$  に比例する。 $\Psi(x, t)$  の状態での物理量  $O(p_x, x)$  の期待値  $\langle O(p_x, x) \rangle$  は  $\int \Psi^*(x, t) O\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, x\right) \Psi(x, t) dx$  で与えられる。

定常状態の波動関数

$$\Psi(x, t) = \phi(x) \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)$$

に対し、時間を含まないシュレーディンガー方程式は

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

となる。

#### 4.1.2 波束

1次元1粒子系で、 $\Psi(x, t)$  で表される状態において、位置座標の不確定性

$$\delta x = (\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2)^{1/2} = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle^{1/2}$$

と運動量の不確定性

$$\delta p_x = (\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2)^{1/2} = \langle (p_x - \langle p_x \rangle)^2 \rangle^{1/2}$$

の間には、ハイゼンベルグの不確定性関係

$$\delta x \cdot \delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

が成り立つ。例えば、ある時刻の波動関数が  $x$  の関数として

$$\Psi(x) = \frac{1}{[2\pi\sigma^2]^{1/4}} \exp \left[ -\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2} + \frac{ip_0x}{\hbar} \right]$$

で与えられている場合、

$$\langle x \rangle = x_0, \quad \langle p_x \rangle = p_0, \quad \delta x = \sigma, \quad \delta p_x = \frac{\hbar}{2\sigma}$$

となり、ハイゼンベルグの不確定性関係の下限をみたしている。この波動関数は

$$|\Psi|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp \left[ -\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2} \right]$$

のように、ガウス型の波束であり、最小波束と呼ばれる。

#### 4.1.3 自由波束の運動

ポテンシャル  $V(x) = 0$  の場合、時間を含まないシュレーディンガー方程式の解は、

$$\begin{aligned} \phi(x) &= u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp \left( \frac{i}{\hbar} p x \right), \\ E &= E(p) = \frac{p^2}{2m} \end{aligned}$$

で与えられる。定常状態の波動関数は

$$\Psi(x, t) = u_p(x) \exp \left( -\frac{i}{\hbar} E(p)t \right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp \left( \frac{i}{\hbar} p x \right) \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t \right)$$

で与えられる。同じエネルギー固有値  $E = \frac{p^2}{2m}$  に対して、 $u_p, u_{-p}$  の線型独立な固有関数が存在する。ここで、 $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} u_p(x) = p u_p(x)$  より  $u_p$  は固有値  $p$  の運動量の固有関数で  $\int u_p^*(x) u_{p'}(x) dx = \delta(p-p')$  という規格化条件をみたす。任意の波動関数は、

$$\Psi(x) = \int \Phi(p) u_p(x) dp$$

のように、運動量の固有関数で展開することができる。ここで、展開係数は

$$\Phi(p) = \int \Psi(x) u_p^*(x) dx$$

で与えられる。

時刻  $t = 0$  での波動関数が

$$\Psi(x, 0) = \int \Phi(p) u_p(x) dp$$

のように  $u_p(x)$  の線型結合で与えられていたとする。定常状態の波動関数

$$u_p(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E(p)t\right)$$

は時間を含むシュレーディンガー方程式の解であるから、その重ね合わせ

$$\int \Phi(p) u_p(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E(p)t\right) dp$$

も時間を含むシュレーディンガー方程式の解であり、 $t = 0$  で  $\Psi(x, 0)$  に一致する。すなわち、 $t = 0$  で  $\Psi(x, 0)$  で与えられる波動関数時間発展は

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \int \Phi(p) u_p(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E(p)t\right) dp \\ &= \iint \Psi(x', 0) u_p^*(x') u_p(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E(p)t\right) dx' dp \end{aligned}$$

で与えられる。 $t = 0$  での波動関数  $\Psi(x, t)$  が、前出の最小波束で与えられたとして、上記の計算をすると、任意の時刻で  $|\Psi(x, t)|^2$  がガウス分布で与えられ、 $\langle x \rangle = x_0 + \frac{p_0}{m}t$ ,  $\delta x = \sigma \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \sigma^4}}$  となることが示せる。

#### 4.1.4 ポテンシャルによる反射と透過

十分大きな  $|x|$  に対して  $V(x) = 0$  となるポテンシャルを考える。時間を含まないシュレーディンガー方程式で、 $E > 0$  となる定常状態を考え、入射波が  $x$  の正の方向に向い、 $x \rightarrow \infty$  で  $x$  の負の方向に進む波をもたない解  $\phi_k(x)$

$$\begin{aligned} x \rightarrow -\infty \quad &\text{で} \quad \phi_k(x) = e^{+ikx} + A(k)e^{-ikx} \\ x \rightarrow +\infty \quad &\text{で} \quad \phi_k(x) = B(k)e^{+ikx} \end{aligned}$$

の形の解を考える ( $k > 0$ )。エネルギー固有値  $E(k) = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$  である。 $\omega(k) = E(k)/\hbar$  とおくと、定常状態の波動関数は、 $\phi_k(x)e^{-i\omega(k)t}$  で与えられる。 $e^{+ikx}e^{-i\omega(k)t}$  は入射波、 $A(k)e^{-ikx}e^{-i\omega(k)t}$  は反射波、 $B(k)e^{+ikx}e^{-i\omega(k)t}$  は透過波を表している。この場合、反射率 (| 反射波の流れの密度 / 入射波の流れの密度 |) は  $R(k) = |A(k)|^2$  に、透過率 (| 透過波の流れの密度 / 入射波の流れの密度 |) は  $T(k) = |B(k)|^2$  になる。 $R(k) + T(k) = 1$  である。

$t < 0$  で  $x < 0$  の十分原点から離れたところに  $\langle p_x \rangle = p_0 = \hbar k_0$  で  $x$  の正の方向に向う波束があり、前と同様に、

$$\Psi(x, t) = \int C(k) \phi_k(x) \exp[-i\omega(k)t] dk$$

と表されていたとする。まず  $\phi_k(x)$  の入射波部分

$$\Psi_{\text{in}}(x, t) = \int C(k) \exp [ikx - i\omega(k)t] dk \quad (x < 0)$$

について考える。 $C(k)$  の絶対値を  $c(k)$ 、偏角を  $\gamma(k)$  とする。 $\theta(k) = kx - \omega(k)t + \gamma(k)$  とおくと、 $\Psi_{\text{in}}(x, t) = \int c(k) e^{i\theta(k)} dk$  とかける。 $c(k)$  は  $k = k_0$  に鋭いピークをもつ。波束の中心は、 $k = k_0$  付近で  $\theta(k)$  の変化の小さい条件、 $\frac{d\theta(k_0)}{dk_0} = 0$  より、

$$x = t \frac{d\omega(k_0)}{dk_0} - \frac{d\gamma(k_0)}{dk_0} \quad (x < 0)$$

で決まる。 $t = 0$  で波束の中心が  $x = 0$  にくるとすると、 $\frac{d\gamma(k_0)}{dk_0} = 0$  である。このとき、波束の中心  $x$  が絶対値の大きな負の値であるためには、 $t$  が絶対値の十分大きな負の値でなくてはならない。次に  $\phi_k(x)$  の透過波の部分

$$\Psi_{\text{tr}}(x, t) = \int C(k) B(k) \exp [ikx - i\omega(k)t] dk \quad (x > 0)$$

について考える。 $B(k)$  の絶対値を  $b(k)$ 、偏角を  $\beta(k)$  とする。 $c(k)b(k)$  は  $k = k_0$  に鋭いピークをもち、波束の中心を決める式は

$$x = t \frac{d\omega(k_0)}{dk_0} - \frac{d\gamma(k_0)}{dk_0} - \frac{d\beta(k_0)}{dk_0} \quad (x > 0)$$

となる。この  $x$  が大きな正の値になるには、 $t$  が十分大きくななくてはならない。同様に、反射波の部分から作られる波束

$$\Psi_{\text{ref}}(x, t) = \int C(k) A(k) \exp [-ikx - i\omega(k)t] dk \quad (x < 0)$$

の中心を決める式は、 $A(k)$  の絶対値を  $a(k)$ 、偏角を  $\alpha(k)$  とすると、

$$x = -t \frac{d\omega(k_0)}{dk_0} + \frac{d\gamma(k_0)}{dk_0} + \frac{d\alpha(k_0)}{dk_0} \quad (x < 0)$$

この  $x$  が絶対値の大きな負の値になるには、 $t$  が十分大きくななくてはならない。以上より、最初に  $x$  の正の方向に向う波束が  $x < 0$  の領域にいた場合 ( $\Psi = \Psi_{\text{in}}$ )、十分時間がたつと、 $x > 0$  の領域で  $x$  の正の方向に向う透過波束と、 $x < 0$  の領域で  $x$  の負の方向に向う反射波束とに分かれる ( $\Psi = \Psi_{\text{tr}} + \Psi_{\text{ref}}$ )、ことがわかる。十分時間がたったとき、反射波束の中に粒子を見いだす確率を波束の反射係数  $R$ 、透過波束の中に粒子を見いだす確率を波束の透過係数  $T$  とすると、

$$R = \frac{\int_{x<0} |\Psi_{\text{ref}}|^2 dx}{\int_{x<0} |\Psi_{\text{ref}}|^2 dx + \int_{x>0} |\Psi_{\text{tr}}|^2 dx} = \frac{\int R(k) |C(k)|^2 dk}{\int |C(k)|^2 dk}$$

$$T = \frac{\int_{x>0} |\Psi_{\text{tr}}|^2 dx}{\int_{x<0} |\Psi_{\text{ref}}|^2 dx + \int_{x>0} |\Psi_{\text{tr}}|^2 dx} = \frac{\int T(k) |C(k)|^2 dk}{\int |C(k)|^2 dk}$$

となる。

## 4.2 数値解法

ここでは、時間を含むシュレーディンガー方程式を時間と空間を離散化して、数値的に解くことを考える。

### 4.2.1 方程式の無次元化

時間を含むシュレーディンガー方程式は時間の単位  $a$ , 長さの単位  $b$  を用いて、 $t = at'$ ,  $x = bx'$  とすると

$$\frac{i\hbar}{a} \frac{\partial}{\partial t'} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2mb^2} \frac{\partial^2}{\partial x'^2} \Psi + V(bx') \Psi$$

となる。 $a = m\hbar^2/b^2$  と選び、 $U(x') = \frac{mb^2}{\hbar^2} V(bx')$  とおくことにより無次元化した方程式

$$i \frac{\partial}{\partial t'} \Psi = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x'^2} \Psi + U(x') \Psi$$

を得る。以下では、 $x'$  を  $x$ 、 $t'$  を  $t$  と書くことにする。

### 4.2.2 離散化

波動関数  $\Psi(x, t)$  を空間を  $x_j = j\Delta x$  のように  $\Delta x$  刻みで、時間を  $t_n = n\Delta t$  のように  $\Delta t$  刻みで離散化して考える。ある時刻  $t_n$  における波動関数を  $\Psi_j = \Psi(x_j, t_n)$  とする。シュレーディンガー方程式の右辺にでてくる  $\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$  の  $x_j$  における値は差分

$$\frac{\Psi_{j+1} - 2\Psi_j + \Psi_{j-1}}{(\Delta x)^2}$$

で置き換える。テイラー展開

$$\Psi_{j\pm 1} = \Psi(x_j \pm \Delta x) = \Psi_j \pm \frac{\partial \Psi}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} (\Delta x)^2 \pm \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 \Psi}{\partial x^3} (\Delta x)^3 + \frac{1}{4!} \frac{\partial^4 \Psi}{\partial x^4} (\Delta x)^4 \pm \dots$$

より

$$\frac{\Psi_{j+1} - 2\Psi_j + \Psi_{j-1}}{(\Delta x)^2} = \frac{2}{2!} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{2}{4!} \frac{\partial^4 \Psi}{\partial x^4} (\Delta x)^2 + \dots$$

となるので、

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{\Psi_{j+1} - 2\Psi_j + \Psi_{j-1}}{(\Delta x)^2} + O((\Delta x)^2)$$

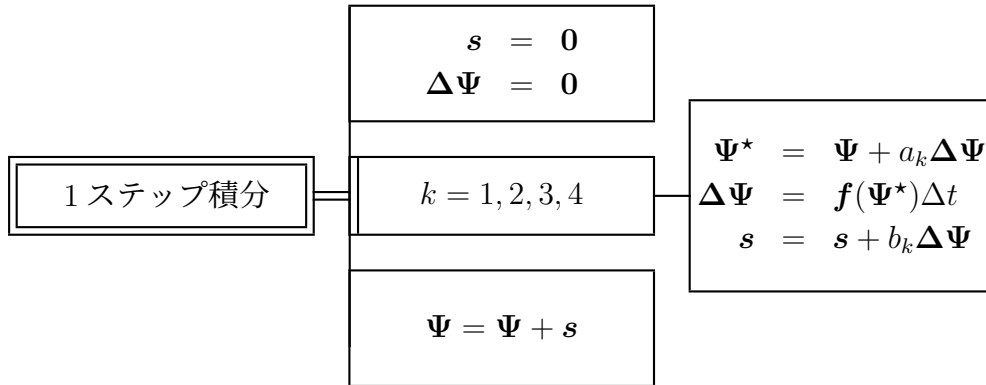
と書け、この差分化による誤差は  $(\Delta x)^2$  の程度となる。シュレーディンガー方程式を時間積分するには4次のルンゲ・クッタ法を用いる。シュレーディンガー方程式は  $\Psi_j$  を第  $j$  成分とするベクトルを  $\Psi$  として

$$\frac{d\Psi}{dt} = f(\Psi)$$

の形にかける。このとき、

$$\begin{aligned} a_1 &= 0, & b_1 &= 1/6, \\ a_2 &= 1/2, & b_2 &= 1/3, \\ a_3 &= 1/2, & b_3 &= 1/3, \\ a_4 &= 1, & b_4 &= 1/6 \end{aligned}$$

であるとして、4次のルンゲ・クッタ法を用いた1ステップ( $\Delta t$ )の積分は、次のPADのように書ける。



これにより、 $\Psi(t)$  から  $\Psi(t+\Delta t)$  が得られる。4次のルンゲ・クッタ法は1ステップ積分するのに  $(\Delta t)^5$  に比例した誤差を含む。一定の時間  $T$  まで積分するには  $T/\Delta t$  ステップかかるので、一定の時間  $T$  まで積分したときの4次のルンゲ・クッタ法の誤差は  $(\Delta t)^4$  に比例すると考えられる。

誤差の評価には、例えばシュレーディンガー方程式で保存される  $\int |\Psi|^2 dx$  の変化を使うことができる。

#### 4.2.3 数値解の安定性

簡単な微分方程式

$$\frac{d\Psi}{dt} = i\lambda\Psi \quad (\lambda: \text{実定数})$$

をルンゲ・クッタ法で  $\Delta t$ (1ステップ) 積分すると、

$$\Psi(t + \Delta t) = \left[ 1 + i\lambda\Delta t + \frac{1}{2!}(i\lambda\Delta t)^2 + \frac{1}{3!}(i\lambda\Delta t)^3 + \frac{1}{4!}(i\lambda\Delta t)^4 \right] \Psi(t) = A\Psi(t)$$

となる。正しい解では  $A = \exp(i\lambda\Delta t)$  でつねに  $|A| = 1$  で  $|\Psi|$  が発散することはない。ルンゲ・クッタで求めた  $A$  は

$$|A| = \left[ \left( 1 - \frac{1}{2!}(\lambda\Delta t)^2 + \frac{1}{4!}(\lambda\Delta t)^4 \right)^2 + \left( \lambda\Delta t - \frac{1}{3!}(\lambda\Delta t)^3 \right)^2 \right]^{1/2}$$

となり、 $\lambda\Delta t \leq 2\sqrt{2}$  ならば  $|A| \leq 1$  である。この安定条件  $\Delta t \leq \frac{2\sqrt{2}}{\lambda}$  がみたされれば数値解は有限にとどまるが、この条件に違反すると数値解は急激に発散する。

シュレーディンガー方程式で  $U = 0$  の場合、長さ 1 の区間を  $J$  等分して、両端で  $\Psi = 0$  の境界条件を課すものとする。 $\Psi(j/J) = \sin(m\pi j/J)$ ,  $m = 1, 2, \dots, J-1$  の形の解を考えれば、

$$\lambda_m = \frac{2 \sin^2 \left( \frac{m\pi}{2J} \right)}{(1/J)^2}$$

となる。十分  $J$  が大きければ安定条件は最大の  $\lambda_m = \lambda_{J-1}$  に対して

$$\Delta t \leq 2\sqrt{2}/\lambda_{J-1} = \frac{\sqrt{2}(\Delta x)^2}{\sin^2 \left( \frac{(J-1)\pi}{2J} \right)} \simeq \sqrt{2}(\Delta x)^2$$

となる。 $V \neq 0$  の場合の安定条件もこれに準じると考えられる。

### 4.3 課題

区間  $[-L, L]$  で、ガウス型の波束 ( $\langle x \rangle = x_0$ ,  $\Delta x = \sigma$ ,  $\langle p_x \rangle = k_0$ ) の初期条件

$$\Psi(x, 0) = N \exp \left[ -\frac{(x - x_0)^2}{4\sigma^2} + ik_0 x \right]$$

と剛体壁 (完全反射) の境界条件

$$\Psi(-L, t) = \Psi(L, t) = 0$$

をみたす無次元化したシュレーディンガー方程式の解を数値的に求める。 $N$  は規格化定数で  $\int |\Psi|^2 dx = 1$  となるように定める。

ポテンシャルのない場合のサンプルプログラムが計算機サーバーの

`/home/kyozai/jy/comp-phys/sec4/wave.f90` にある。空間の分点数  $J_{\max}$ , 出力回数  $N_{\max}$ , 1 回の出力あたりの時間反復回数  $N1_{\max}$ ,  $L$ ,  $\sigma$ ,  $k_0$ ,  $x_0$ , 時間刻み  $\Delta t$  を与えると走るようになっている。

- 4-A. ポテンシャルのない場合に、 $L = 4$ ,  $\sigma = 0.1$ ,  $k = 20$ ,  $x_0 = -0.5$  として、時刻  $t = 0$  から  $t = 0.05$  迄の  $\langle x \rangle$  の時間変化と  $(\delta x)^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$  の時間変化を調べよ。空間の刻み  $\Delta x$  を  $1/64$ ,  $1/128$ ,  $1/256$  と変えて時刻  $t = 0.05$  における  $\langle x \rangle$  と  $\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$  を求め、横軸を  $(\Delta x)^2$  とし、縦軸を  $\langle x \rangle$  または  $\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$  としてプロットせよ。空間の差分化による誤差が  $(\Delta x)^2$  に比例しているとして、時刻  $t = 0.05$  における  $\langle x \rangle$  と  $\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$  の値を推定し、4.1.3 節に与えられたガウス波束に対する時間変化の結果

$$\langle x \rangle = x_0 + k_0 t, \quad \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \sigma^2 \left( 1 + \frac{t^2}{4\sigma^4} \right)$$

と比較せよ。



注意:  $\Delta x$  はプログラムでは  $\Delta x = 2L/J_{\max}$  で与えられる。

$\Delta t$  は 4.2.3 節の最後の式の安定条件  $\Delta t \leq \sqrt{2}(\Delta x)^2$  を満たすことを目安に選ぶ。

$N_{\max}$  は 100 程度にし、 $N_{\max} \times N1_{\max} \times \Delta t = 0.05$  となるように  $N1_{\max}$  を選ぶ。

- 4-B. 次頁の表の A のポテンシャルに対し、ある  $k_0$  と  $\sigma$  を選び、いろいろな  $\Delta x$  について、反射率、透過率を計算せよ。 $\Delta x \rightarrow 0$  でのその  $k_0$  と  $\sigma$  に対する反射率、透過率を推定せよ。 $k_0 = 30, 35, 40, 45, 50, 55, 60$ 、 $\sigma = 0.4, 0.6, 0.8$ 、 $\Delta x = 1/64, 1/128, 1/256$  などと選べ。

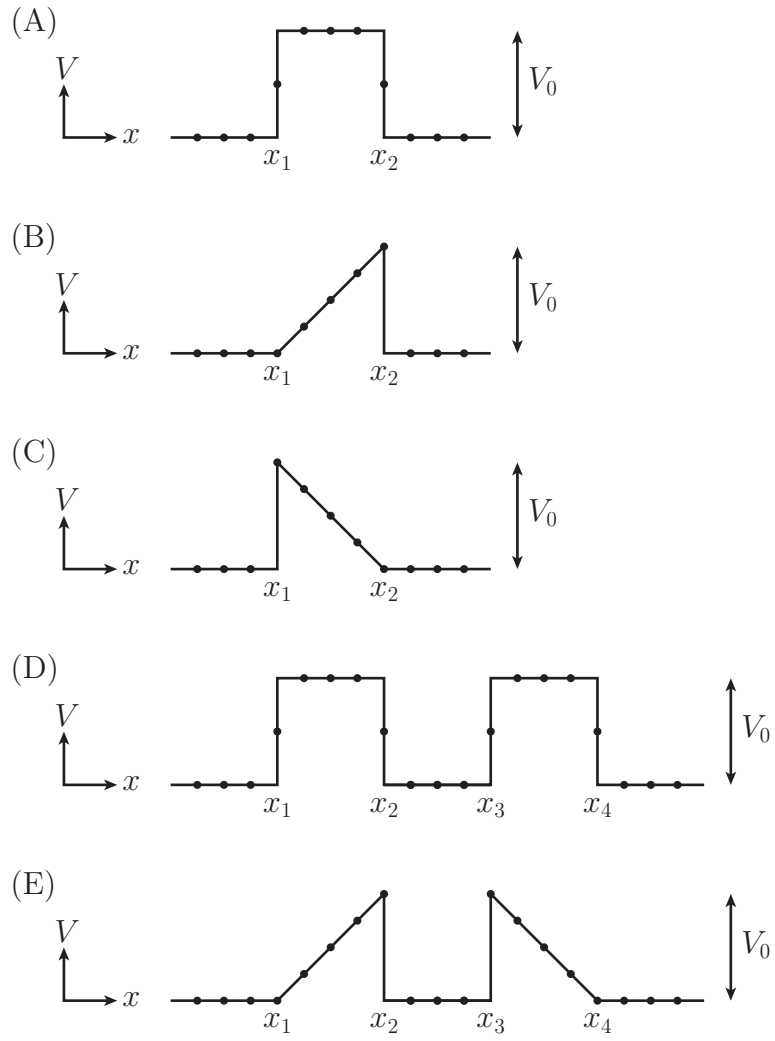
注意: ポテンシャルの位置を  $x_1 = 0$ ,  $x_2 > 0$  と選ぶ。

$L$  は  $6\sigma$  より大きくとり、 $x_0 = -L/2$  とする。 $(3/2)L/k_0$  の時刻まで計算を行なう。

- 4-C. 4-B の計算をいろいろな  $\sigma$  に対して行ない、 $\sigma \rightarrow \infty$  での反射率、透過率を推定せよ。

- 4-D. 次頁の表の B,C,D,E のいずれかのポテンシャルに対し、4-C と同じことを行なえ。

型	$V_0$	$ x_{n+1} - x_n $
A	800	5/32
B	800	3/16
C	800	3/16
D	600	9/64
E	600	9/64



#### 4.4 補足: X ウィンドウ上に図形を描くプログラム

/home/kyozai/jy/comp-phys/sec4 というディレクトリの下のサンプルプログラム wave.f90 を X ウィンドウ上に波動関数の形を描きながら走るように改めたものが、同じディレクトリの下で wavex.f90 と xsub.c です。

これらは、X11 上で表示するためのプログラムです。ITC のワークステーションルームの Linux 端末では、X11(X-window システム) が起動しています。

wavex.f90 の方はメインプログラムで、xsub.c の方は fortran で書かれたメインプログラムから X ウィンドウ上に図形を描くためのサブルーチンで C 言語で書かれています。

これらのプログラムのコンパイル、リンクの方法は 3.5.2 節の説明と同じです。これらのファイルを自分のディレクトリにコピーした後、まず xsub.c をコンパイルします。

```
% gcc -I/usr/include/X11 -c xsub.c ↵
```

とタイプすることにより、xsub.c がコンパイルされ、オブジェクト・ファイル xsub.o が作られます。次に wavex.f90 をコンパイルします。

```
% gfortran -fno-underscoring -c wavex.f90 ↵
```

とタイプすることにより、wavex.f90 がコンパイルされ、オブジェクト・ファイル wavex.o が作られます。最後に、これらをリンクします。

```
% gfortran wavex.o xsub.o -lX11 ↵
```

とタイプすることにより、wavex.o と xsub.o および X ウィンドウ用のサブルーチンがリンクされ実行可能ファイル a.out が作られます。wavex.f90 のコンパイルと最後のリンクは

```
% gfortran -fno-underscoring wavex.f90 xsub.o -lX11 ↵
```

とタイプすることにより一度に行なうこともできます。

次に、このプログラムを実行します。理工学 ITC のワークステーションルームのワークステーションからリモートログインして計算サーバを使っているとき、このプログラムを計算サーバで走らせて理工学 ITC のワークステーションの X ウィンドウの画面上に図形を描かせることができます。そのための準備に関しては、3.5.1 節の説明を参照してください。