

計算数理工学PBL・講義ノート(第3期)

基礎科学系・量子物理学部門 鎌田裕之

平成29年12月4日

目次

第 1 章	電磁気学	2
1.1	クーロンの法則	2
1.2	ラプラスの方程式	2
1.2.1	境界条件のあるラプラス方程式の解法	3
1.3	マクスウェルの方程式	7
1.3.1	Gauss の法則	7
1.3.2	Farady の法則	7
1.3.3	Maxwell-Ampère の法則	8
1.3.4	面積ベクトル	8
第 2 章	波動	10
2.1	波動方程式	10
2.1.1	1 次元問題	11
2.2	弾性体を伝わる横波	12
2.3	弾性体を伝わる縦波	13
2.4	連成振動によるシミュレーション	14
2.5	量子力学	15
2.6	無限に深い井戸型ポテンシャル	15
2.7	シュレーディンガー方程式の数値解	17
2.7.1	具体例	17
第 3 章	熱伝導	19
第 4 章	Appendix: 面積積分の方法	21
4.1	(例 1)	21
4.2	(例 2)	22

第1章 電磁気学

1.1 クーロンの法則

静電気の電磁気学は、クーロンの法則から始まる。2つの電荷 A,B のそれぞれの電荷量を q_A, q_B とし、 r の距離を隔てた場合、電荷 A、B に働く力 \vec{F}_A , \vec{F}_B は、それぞれ

$$\begin{aligned}\vec{F}_A &= \frac{q_A q_B}{4\pi\epsilon_0 r^2} \frac{\vec{r}_A - \vec{r}_B}{r}, \\ \vec{F}_B &= \frac{q_A q_B}{4\pi\epsilon_0 r^2} \frac{\vec{r}_B - \vec{r}_A}{r}\end{aligned}\quad (1.1)$$

と与えられる。ここで、 \vec{r}_A, \vec{r}_B は、電荷 A,B の位置ベクトルである。 $(\vec{r} \equiv \vec{r}_A - \vec{r}_B)$ q_A と q_B が同符号の場合は斥力で、異符号の場合は引力が働く。 ϵ_0 は、真空の誘電率と呼ばれ、 $8.8541878 \cdots \times 10^{-12} [F/m]$ という値を持っている。

(問題 1.1-1)

原点に 5 [C] の電荷、座標 (1 , 1 , 2) [m] に 3 [C] の電荷を置いたとき、お互いに働く力を求めよ。

1.2 ラプラスの方程式

電場は、単位電荷当りの力と解釈することが出来る。力 \vec{F} と位置エネルギー U との間に、

$$\vec{F} = -grad U = -\nabla U = \left(-\frac{\partial U}{\partial x}, -\frac{\partial U}{\partial y}, -\frac{\partial U}{\partial z}\right) \quad (1.2)$$

の関係があるように、電場 \vec{E} と電位 V との間には

$$\vec{E} = -grad V = -\nabla V = \left(-\frac{\partial V}{\partial x}, -\frac{\partial V}{\partial y}, -\frac{\partial V}{\partial z}\right) \quad (1.3)$$

の関係がある。空間に電荷がある場合には、その電荷密度を ρ として、

$$\nabla \cdot \vec{E} = \text{div} \vec{E} = \rho / \varepsilon_0 \quad (1.4)$$

のガウスの法則が成り立つので、式 (1.3) をこれに代入すれば、

$$\nabla \cdot \vec{E} = \text{div} \vec{E} = -\nabla^2 V = -\Delta V = \rho / \varepsilon_0 \quad (1.5)$$

即ち、

$$\Delta V = -\rho / \varepsilon_0 \quad (1.6)$$

が成り立つ。これをポアソン方程式と呼ぶ。特に電荷が 0 の時 ($\rho = 0$) は、ラプラス方程式と呼ぶ。

1.2.1 境界条件のあるラプラス方程式の解法

ラプラス方程式

$$\Delta V = 0 \quad (1.7)$$

解くことを考えよう。これを、 x, y, z 直交座標系の微分で書けば、

$$\frac{\partial^2 V(x, y, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V(x, y, z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 V(x, y, z)}{\partial z^2} = 0 \quad (1.8)$$

である。オイラー法でこれを差分で書き下せば、2 階の微分は、それぞれの項に対して

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 V(x, y, z)}{\partial x^2} &= \frac{V(x + \Delta x, y, z) - 2V(x, y, z) + V(x - \Delta x, y, z)}{(\Delta x)^2}, \\ \frac{\partial^2 V(x, y, z)}{\partial y^2} &= \frac{V(x, y + \Delta y, z) - 2V(x, y, z) + V(x, y - \Delta y, z)}{(\Delta y)^2}, \\ \frac{\partial^2 V(x, y, z)}{\partial z^2} &= \frac{V(x, y, z + \Delta z) - 2V(x, y, z) + V(x, y, z - \Delta z)}{(\Delta z)^2}, \end{aligned} \quad (1.9)$$

が成り立つので、 $\Delta x = \Delta y = \Delta z$ を仮定すれば、式 (1.8) は、

$$\begin{aligned} &V(x + \Delta x, y, z) - 2V(x, y, z) + V(x - \Delta x, y, z) \\ &+ V(x, y + \Delta y, z) - 2V(x, y, z) + V(x, y - \Delta y, z) \end{aligned}$$

$$+ V(x, y, z + \Delta z) - 2V(x, y, z) + V(x, y, z - \Delta z) = 0, \quad (1.10)$$

であるから、結局、

$$\begin{aligned} V(x, y, z) &= \frac{1}{6} \left(V(x + \Delta x, y, z) + V(x - \Delta x, y, z) \right. \\ &\quad + V(x, y + \Delta y, z) + V(x, y - \Delta y, z) \\ &\quad \left. + V(x, y, z + \Delta z) + V(x, y, z - \Delta z) \right) \end{aligned} \quad (1.11)$$

を得る。この式は、次のように解釈できる。即ち、任意の点の電位は、隣接している点の平均の値になっている。右左、前後、上下の 6 点の平均になっている。2 次元平面の場合は、この式は

$$\begin{aligned} V(x, y) &= \\ \frac{1}{4} &\left(V(x + \Delta x, y) + V(x - \Delta x, y) + V(x, y + \Delta y) + V(x, y - \Delta y) \right) \end{aligned} \quad (1.12)$$

と修正でき、1 次元の場合は更に

$$V(x) = \frac{V(x + \Delta x) + V(x - \Delta x)}{2} \quad (1.13)$$

となることは容易に理解できる。

1 次元の場合を解いてみよう。微分方程式で書けば、元々、

$$\frac{d^2 V(x)}{dx^2} = 0 \quad (1.14)$$

であるから、その解析解は、

$$V(x) = Ax + B \quad (1.15)$$

である。但し、 A, B は定数。

これでは、単純すぎるので、式 (1.13) を用いて、数値的に解いてみよう。(この試みは、2 次元、3 次元にも応用できる) 具体的に、 $x = 0[\text{m}]$ 、 $x = 10[\text{m}]$ の点でそれぞれ 3 [V]、10 [V] の電位を保つ場合、 $0 < x < 10$ の範囲の電位を求めてみよう。

以下にそのプログラムを示す。1 m 間隔に、求めたい点 (グリッド) をとる。アルゴリズムは次のようになっている。

- 1 . $x = 0$ と $x = 10$ 以外の初期値を 0 と設定する。
- 2 . $x = 0$ と $x = 10$ 以外の計算を式 (1.13) を用いて計算する。

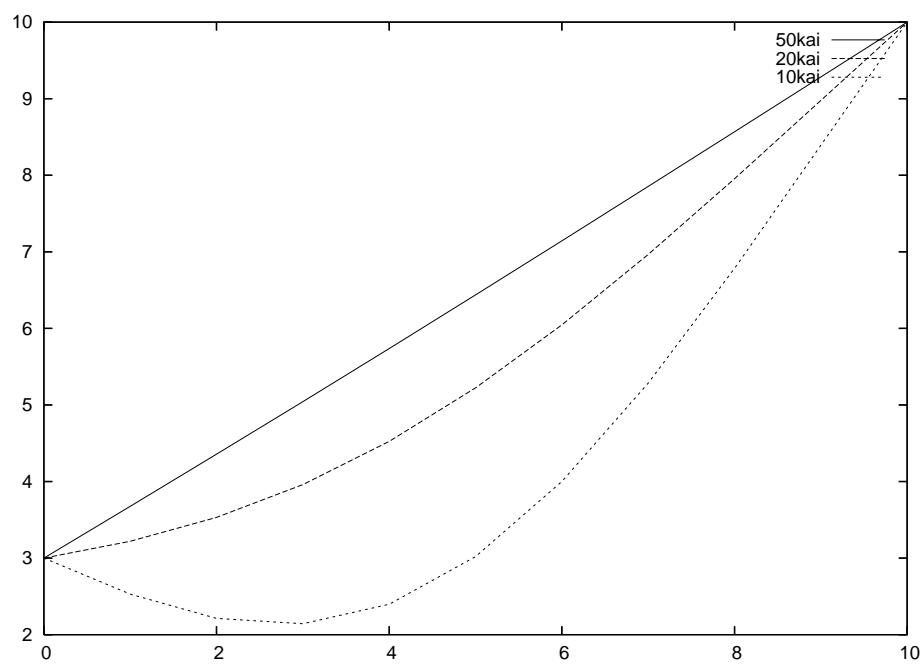


図 1.1: 1次元電位図：横軸は座標、縦軸は電位である。点線、破線、実線は、それぞれ繰り返し計算を10回、20回、50回行った結果である。

3 . 2 . を収束するまで繰り返す。

```
/* denni1.c */
#include < stdio.h >
main(){
double V[11];
int i,j,imax=50;
V[0]=3.0;
V[10]=10.0;
for(j=1;j < 10;j++){
V[j]=0.0;
}
for(i=0;i < imax;i++){
for(j=1;j < 10;j++){
V[j]=(V[j-1]+V[j+1])*0.5;
}
}
for(j=0;j < 11;j++)
printf(" %d %f ¥n", j,V[j]);
}
```

(問題 1.2-1)

2次元の場合にこれを拡張し、具体的に次の境界条件の下で、各点の電位を求めよ。

ケース1 . 境界条件: 領域は、 $0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1$ の正方形の領域で、各辺の電位は全て、10 [V] とする。

ケース2 . 境界条件: 領域はケース1と同じで、辺の電位を次のように設定する。

辺: $(x, y) = (0, 0) - (1, 0)$ の電位を3 [V] に固定する。

辺: $(x, y) = (0, 0) - (0, 1)$ の電位を7 [V] に固定する。

辺: $(x, y) = (1, 0) - (1, 1)$ の電位を-10 [V] に固定する。

辺: $(x, y) = (0, 1) - (1, 1)$ の電位を0 [V] に固定する。

ケース3: ケース2と同じ設定で、点(0.5,0.5)を2 [V] に固定する。

1.3 マクスウェルの方程式

電磁気学は、マクスウェルの4つの方程式によってその理論的な体系化はなされた。微分形式で書けば、

$$\begin{aligned}
 \text{電場のガウスの法則：} & \quad \nabla \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0} \\
 \text{磁束密度のガウスの法則：} & \quad \nabla \cdot \vec{B} = 0 \\
 \text{ファラデーの法則：} & \quad \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -\nabla \times \vec{E} \\
 \text{マクスウェル・アンペールの法則：} & \quad \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon_0 \mu_0} \nabla \times \vec{B} - \frac{1}{\varepsilon_0} \vec{j}
 \end{aligned} \tag{1.16}$$

の4つである。 $\vec{E}, \vec{B}, \vec{j}, \rho$ はそれぞれ、電場、磁束密度、電流密度、電荷密度である。また、 $\varepsilon_0 \mu_0$ はそれぞれ真空の誘電率と透磁率である。

1.3.1 Gauss の法則

電気のガウスの法則は、積分形で与えれば、

$$\oint \vec{E} \cdot d\vec{S} = \int \vec{\nabla} \cdot \vec{E} dV = \int \frac{\rho}{\varepsilon_0} dV = \frac{Q}{\varepsilon_0} \tag{1.17}$$

である。ここで、 \oint は閉じた曲面において面積積分を行う意味である。 $\int dV$ は体積積分である。

磁気も同様に

$$\oint \vec{B} \cdot d\vec{S} = \int \vec{\nabla} \cdot \vec{B} dV = 0 \tag{1.18}$$

のように積分で書くことができる。

1.3.2 Farady の法則

ファラデーの法則の両辺を面積分をすれば、

$$\begin{aligned}
 \int \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \cdot d\vec{S} &= \frac{\partial \Phi}{\partial t}, \\
 - \int \vec{\nabla} \times \vec{E} \cdot d\vec{S} &= - \oint \vec{E} \cdot d\vec{s} = -V,
 \end{aligned} \tag{1.19}$$

となり、線積分の回路はすなわち、開曲面の端（輪郭）になる。したがって、

$$V = - \frac{\partial \Phi}{\partial t} \quad (1.20)$$

となり、これは電磁誘導の式である。

1.3.3 Maxwell-Ampère の法則

マクスウェル・アンペールの法則で、電場の時間変化を無視すれば、

$$\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \vec{j} \quad (1.21)$$

となる。これを両辺で開いた曲面について面積分を行えば、

$$\int \nabla \times \vec{B} \cdot d\vec{S} = \oint \vec{B} \cdot d\vec{r} = \mu_0 \int \vec{j} \cdot d\vec{S} = \mu_0 I \quad (1.22)$$

となり、これはアンペールの法則である。また、アンペールの法則とビオ・サバールの法則は同じ物理的意味を持っている。ビオ・サバールの式は、電流を I とし、その電流にそって流れる線素を $d\vec{r}'$ とすれば、

$$\vec{B}(\vec{r}) = \frac{\mu_0 I}{4\pi} \oint \frac{d\vec{r}' \times (\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} \quad (1.23)$$

によって求められる。

$$\oint \vec{B} \cdot d\vec{r} = \frac{\mu_0 I}{4\pi} \oint \oint \frac{d\vec{r}' \times (\vec{r} - \vec{r}') \cdot d\vec{r}}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} = \frac{\mu_0 I}{4\pi} 4\pi = \mu_0 I \quad (1.24)$$

2重積分は 4π (全立体角) になることから証明できる。

1.3.4 面積ベクトル

面積ベクトルは、面内のベクトルに垂直な方向を持っている。すなわち、面ベクトルは面の法線方向 \hat{n} を向いている。面ベクトルの大きさ S は面積である。

$$\vec{S} = S\hat{n} \quad (1.25)$$

したがって、面積分は、この面積ベクトルと内積を計算しながら計算しなければならない。

$$\int \vec{A} \cdot d\vec{S} = \sum_i \vec{A}_i \cdot \Delta\vec{S}_i = \sum_i A_{x,i} \Delta S_{x,i} + A_{y,i} \Delta S_{y,i} + A_{z,i} \Delta S_{z,i} \quad (1.26)$$

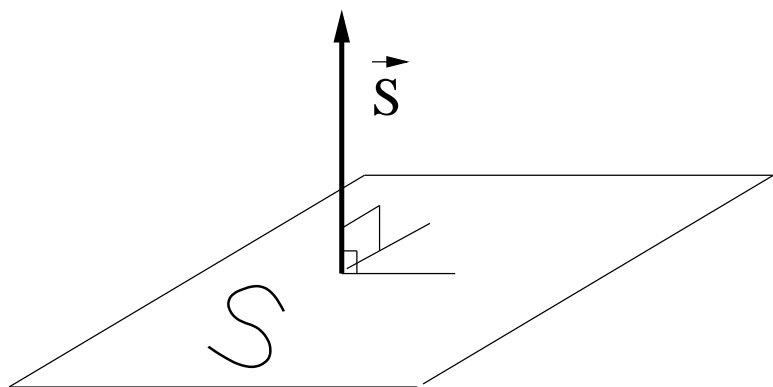


図 1.2: 面ベクトル

第2章 波動

波動は現代科学の最先端の分野である「量子力学」につながっている。1905年に26歳のA.Einsteinは、光は粒子でもあり波動でもあることを示してNobel賞を受賞した。ここでは、古典的な波動現象のPBL課題と量子力学の基礎的なSchrödinger方程式についてPBL課題を考えている。

2.1 波動方程式

波動（波）は、媒質中を伝わるエネルギーと理解されている。日常茶飯事に現れる波動は、次の波動方程式を満たしている。波動の変位を $\psi(x, y, z, t)$ とすれば、それは座標 (x, y, z) と時間 t の関数で表される。

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} \quad (2.1)$$

この波動方程式の一般解は、次のように与えられる。

$$\begin{aligned} \psi(x, y, z, t) &= \psi(\vec{r}, t) = f(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) + g(\vec{k} \cdot \vec{r} + \omega t) \\ &= f(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t) + g(k_x x + k_y y + k_z z + \omega t). \end{aligned} \quad (2.2)$$

ただし、 $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$, ω は、それぞれ波数ベクトル、角振動数である。これらは次式を満たす。

$$\vec{k} \cdot \vec{k} = k^2 = \frac{\omega^2}{c^2}. \quad (2.3)$$

f と g は1変数の任意の関数である。そして、 f と g は、波数ベクトルの方向に対して、それぞれ進行波と後退波を表している。 c は波動の進む速度になる。

波動方程式(2.1)の一般解は、(2.2)によって解かれているのだから、問題は、境界条件によって f と g を決めることである。

2.1.1 1次元問題

1次元の問題にすれば、問題は易しくなる。式(2.1)は、

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} \quad (2.4)$$

となり、その解も

$$\psi(x, t) = f(kx - \omega t) + g(kx + \omega t) \quad (2.5)$$

となる。

解を

$$\psi(x, t) = X(x)T(t) \quad (2.6)$$

と仮定して、(2.4)式に代入して $\psi(x, t)$ で割れば、

$$\frac{d^2 X(x)}{dx^2} \frac{1}{X(x)} = \frac{X''(x)}{X(x)} = \frac{1}{c^2} \frac{T''(t)}{T(t)} \equiv -k^2 \quad (2.7)$$

となり、 x と t が独立変数であることから、 $-k^2$ を定数 A として、

$$\begin{aligned} X''(x) &= -k^2 X(x) \\ T''(t) &= -k^2 c^2 T(t) \end{aligned} \quad (2.8)$$

のように書ける。これは、振動解として

$$\begin{aligned} X(x) &= A \exp(\pm ikx) \\ T(t) &= B \exp(\pm ikct) \end{aligned} \quad (2.9)$$

を得る。したがって、(2.6)式は、

$$\psi(x, t) = \sum_k A_k \exp(\pm ikx) \exp(\pm ikct) \quad (2.10)$$

と書ける。定数 k は、離散的な定数の場合と連続的な定数の両方用いることができる。離散的な場合は、境界条件によって一般に固定端と自由端かによって条件がかけられる。例えば、 $x = 0$ と $x = L$ で固定端の場合、波動は

$$\begin{aligned} \psi(0, t) &= 0 \\ \psi(L, t) &= 0 \end{aligned} \quad (2.11)$$

の条件となる。よって、(2.10) は、

$$\psi(x, t) = \sum_n \sin(\pi n \frac{x}{L}) \{A_n \cos(\pi n \frac{ct}{L}) + B_n \sin(\pi n \frac{ct}{L})\} \quad (2.12)$$

のみが許される。 $(k = \frac{n\pi}{L})$

これを式変形すれば、

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \sum_n \sin(\pi n \frac{x}{L}) \{A_n \cos(\pi n \frac{ct}{L}) + B_n \sin(\pi n \frac{ct}{L})\} \\ &= \sum_n \frac{A_n}{2} \{ \sin \frac{\pi n}{L}(x - ct) + \sin \frac{\pi n}{L}(x + ct) \} \\ &\quad + \frac{B_n}{2} \{ \cos \frac{\pi n}{L}(x - ct) - \cos \frac{\pi n}{L}(x + ct) \} \\ &= \sum_n \{ \frac{A_n}{2} \sin \frac{\pi n}{L}(x - ct) + \frac{B_n}{2} \cos \frac{\pi n}{L}(x - ct) \} \\ &\quad + \{ \frac{A_n}{2} \sin \frac{\pi n}{L}(x + ct) - \frac{B_n}{2} \cos \frac{\pi n}{L}(x + ct) \} \\ &= F(x - ct) + G(x + ct) = f(kx - \omega t) + g(kx + \omega t) \end{aligned} \quad (2.13)$$

となり、進行波と後退波に分解できた。

2.2 弾性体を伝わる横波

長さ L 線密度 μ の弦が x 軸に沿って張力 S で張っている。(図 2.1 参照)
任意の点 x で、長さ Δx の部分を考えると、その両端には張力 S で引っ張られているが軸に垂直な変位 $y(x, t)$ 軸の方向にはわずかな力の差がある。左端の張力の y 成分 $S_y(x)$ は、

$$S_y(x) = -S \frac{\partial y(x, t)}{\partial x} \quad (2.14)$$

で、右端のそれ $S_y(x + \Delta x)$ は

$$S_y(x + \Delta x) = S \frac{\partial y(x + \Delta x, t)}{\partial x} \quad (2.15)$$

となり、合力は

$$F = S_y(x) + S_y(x + \Delta x) = -\frac{\partial y(x, t)}{\partial x} + S \frac{\partial y(x + \Delta x, t)}{\partial x} = S \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} \Delta x \quad (2.16)$$

一方、この力は弦の運動方程式に代入すれば、

$$\text{質量} \times \text{加速度} = (\mu \Delta x) \frac{\partial^2 y(x, t)}{\partial t^2} = F = S \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} \Delta x \quad (2.17)$$

となり、 Δx を消去すれば、波動方程式を得る。

$$\frac{\partial^2 y(x, t)}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 y(x, t)}{\partial t^2} \quad (2.18)$$

ただし、 c は、

$$c = \sqrt{\frac{S}{\mu}} \quad (2.19)$$

であり、波の速度を表す。

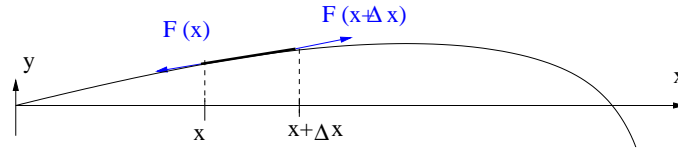


図 2.1: 横波の概念図

2.3 弾性体を伝わる縦波

考え方は、横波と同じであるが、 x 軸に弾性体を置いて、自然長 x からのずれ（変位）を $u(x, t)$ としている。（図 2.2 参照）この伸びの差がフックの法則から力を与えることになる。 x と $x + \epsilon$ の間の伸びは、

$$\Delta L = u(x + \epsilon, t) - u(x, t) = \frac{\partial u}{\partial x} \epsilon \quad (2.20)$$

ヤング率の考え方から、

$$F(x) = AE \frac{\Delta L}{\epsilon} = AE \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \quad (2.21)$$

となり、ここで、 E はヤング率、 A は弾性体の断面積である。体積密度を ρ すれば、 Δx の長さの部分に対して、右側の力と左側の力の合力から運動方程式は、

$$(\rho A \Delta x) \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = F(x + \Delta x) - F(x) = AE \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \Delta x \quad (2.22)$$

となる。 Δx を消去すれば、波動方程式を得る。

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} \quad (2.23)$$

ただし、 c は、

$$c = \sqrt{\frac{E}{\rho}} \quad (2.24)$$

であり、波の速度を表す。

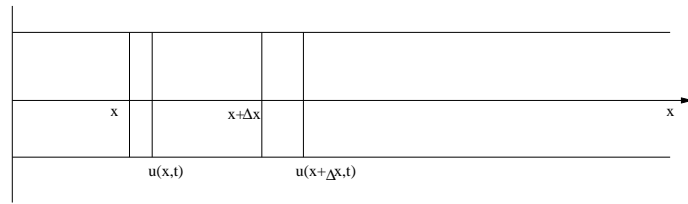


図 2.2: 縦波の概念図

2.4 連成振動によるシミュレーション

縦波の場合をシミュレーションしてみよう。弦を $N - 1$ 個の質点を数珠つなぎにしたものとする。(1 番目から $N - 1$ 番目とする)(図 2.3 参照)
 i 番目の質点に注目すると、その質点に働く力は、ばね定数を k とすれば、

$$F_i = -k(x_i - x_{i-1} - l) - k(x_i - x_{i+1} + l) = k(x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}) \quad (2.25)$$

l は、ばねの自然長を表す。ばねの伸びを u_i とすると、 $x_i = li$ で、 $u_i = x_i - li$ であるから

$$\begin{aligned} \Delta u_i &= x_{i+1} - x_i \\ \Delta^2 u_i &= x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1} \end{aligned} \quad (2.26)$$

とみなすことができる。 $\Delta^2 u_i$ は、 $\partial^2 u / \partial x^2$ に対応する。運動方程式は、

$$m \frac{d^2 x_i}{dt^2} = F_i = k(x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}) \quad (2.27)$$

である。これは、 $2(N-1)$ 個の連立した 1 階の微分方程式に書ける。すなわちオイラー法によって解ける。

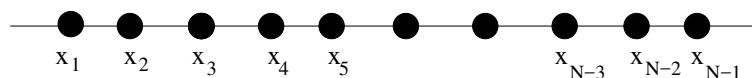


図 2.3: 連成振動

2.5 量子力学

古典力学では、ニュートンの運動方程式を解くことが、物理の問題を解くこととした様に、量子力学ではシュレディンガー方程式を解くことが基本になる。シュレディンガー方程式は、つぎのような形をしている。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (2.28)$$

ここで、 m, ψ, V, E は、それぞれ粒子の質量、波動関数、位置エネルギー、エネルギー固有値を表している。また、 \hbar はプランク定数を 2π で割った定数である。

$$\hbar \equiv \frac{h}{2\pi}. \quad (2.29)$$

不思議なことに、このシュレディンガー方程式もニュートンの方程式と同じく 2 階の微分方程式になっている。それは兎も角、このシュレディンガー方程式を解いてみよう。

2.6 無限に深い井戸型ポテンシャル

教科書には、無限に壁が高いポテンシャルの場合を扱うことで、その解が初等関数で表せる場合を専ら扱うので、少しポテンシャルが具体的なものになると、途端に手では（解析的に）解くことが出来なくなる。しかし、導入としては、先ず、無限に深い（あるいは、壁が無限に高い）井戸型ポテンシャルを扱ってみよう。ポテンシャルの底を 0 エネルギーとする場合が、一般的である。

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 & (-a \leq x \leq a) \\ &= \infty & (\text{それ以外の領域}) \end{aligned} \quad (2.30)$$

ポテンシャルの領域以外では、方程式を満たす波動関数は0以外ない。ポテンシャル内のシュレディンガー方程式は、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \quad (2.31)$$

となり、これは、古典力学の単振動の問題

$$m \frac{d^2x(t)}{dt^2} = -kx(t) \quad (2.32)$$

と同じ形であるから、直ちに解ける。答えは、

$$\psi(x) = A \sin(kx + \delta) \quad (2.33)$$

で、波数 k は、

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar \quad (2.34)$$

である。境界条件は、

$$\psi(\pm a) = 0 \quad (2.35)$$

である。 δ を0または $\pi/2$ にとれば、

$$\begin{aligned} \psi(x) &= A \sin\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) \quad (n \text{ は偶数}) \\ &= A \cos\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) \quad (n \text{ は奇数}) \end{aligned} \quad (2.36)$$

の解をえる。即ち、波数 k は、 $n\pi/2a$ であるから、

$$E = \frac{\hbar k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n^2 \pi^2}{4a^2}. \quad (2.37)$$

また、規格化は、

$$\int_{-a}^a \psi^2(x) dx = 1. \quad (2.38)$$

となるから、 $A = \frac{1}{\sqrt{a}}$ を得る。

(問題 2.6-1)

$m = \hbar = 1$ の単位系で、更に $a = 1$ の時の波動関数を数値的にもとめよ。

2.7 シュレーディンガー方程式の数値解

式 (2.28) の Schrödinger 方程式を式変形すれば、

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)\psi(x) \quad (2.39)$$

となり、2階の微分方程式である。これは、新しい問題ではなく、オイラー法によって解くことができる。(時間 t の代わりに座標 x になっているだけ)ただし、位置エネルギー $V(x)$ や質量 m は与えてあるが、エネルギー E は未知数である。(\hbar は定数) E も求める量である。次の手順で試みよう。

(1) $E > V_{min}$ かつ $E < 0$ の範囲で E を色々変えて計算する。(複数の E が見つかる場合がある)

(2) $x = 0$ で、 $\psi(0) = 1, \frac{d\psi}{dx} = 0$ を仮定する。

(3) オイラー法で、式 (2.39) をある程度の x まで解いていく。 $V(x)$ が 0 になるので、波動関数 ψ は、いずれ発散していくが、上手に E を選べば発散がどんどん遠のいていく。この遠のいていく場合の E が固有エネルギー (解) である。

2.7.1 具体例

2.4 図のような障壁をもつポテンシャルにおける波動関数を求めてみよう。($\hbar = 1, m = 1$)

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (x < 1) \\ 10 & (x > 1) \end{cases} \quad (2.40)$$

2.5 図は $E=0.86$ とした場合 (実線) の波動関数と $E=0.87$ とした場合 (破線) を比較したものである。 x が十分大きな所では、それぞれ正負に発散する。真の答えは、 $E=0.86$ と $E=0.87$ との間にある。

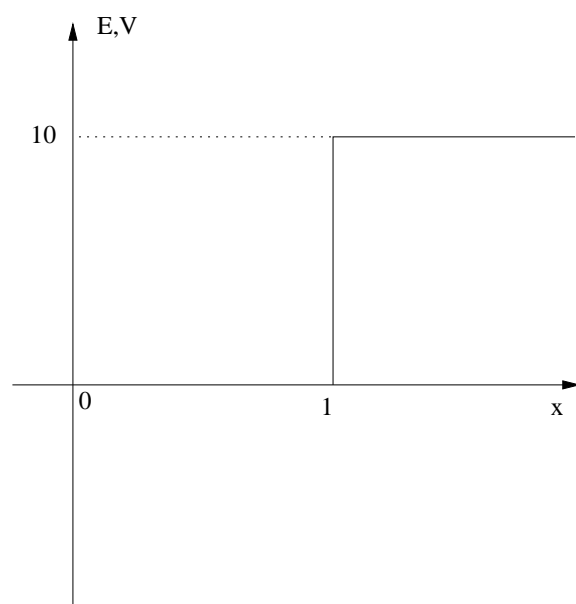


図 2.4: ポテンシャル

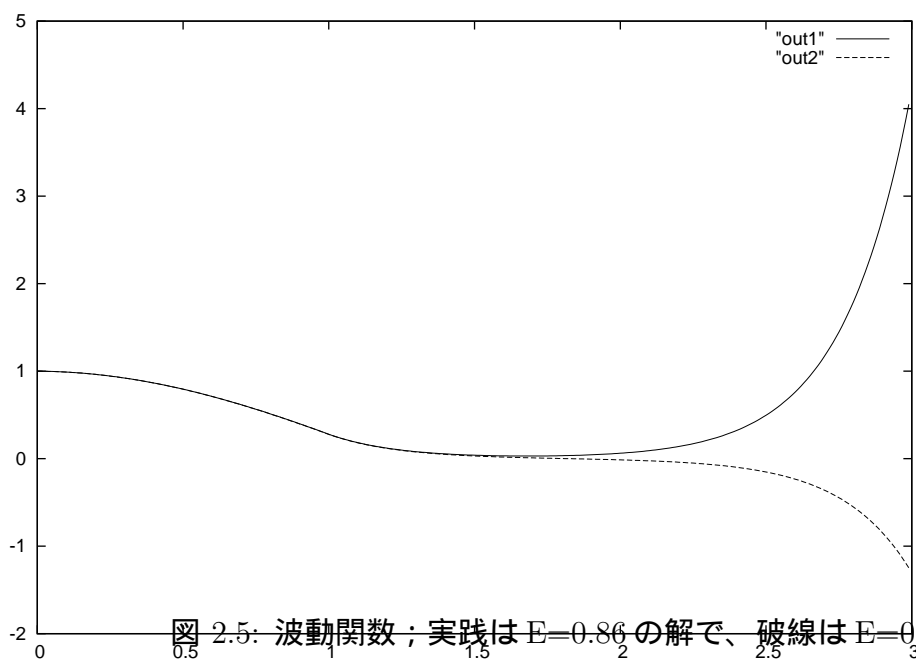


図 2.5: 波動関数；実践は $E=0.86$ の解で、破線は $E=0.87$ の解

第3章 熱伝導

熱伝導現象は次の放物線型の2階の偏微分方程式で記述される。

$$C_v \frac{\partial \mathcal{T}}{\partial t} = \lambda \left(\frac{\partial^2 \mathcal{T}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \mathcal{T}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \mathcal{T}}{\partial z^2} \right) \quad (3.1)$$

ここで T, C_v, λ はそれぞれ、温度、体積当たりの熱容量、熱伝導率を表す。まずは、一次元を考え、波動の場合と同じように変数分離法を仮定すれば、

$$\mathcal{T} = \mathcal{T}(t, x) = T(t)X(x) \quad (3.2)$$

とにおいて、方程式に代入し、 $\mathcal{T}(t, x)$ 全体で割れば、

$$C_v \frac{T'(t)}{T(t)} = \lambda \frac{X''(x)}{X(x)} \equiv -c \quad (3.3)$$

と書いて、これは定数でなくてはならないことが分かる。(変数の一次独立性) その定数を $-c$ と置こう。2つの方程式を得る。

$$\begin{aligned} C_v T''(t) &= -cT(t) \\ \lambda X''(x) &= -cX(x). \end{aligned} \quad (3.4)$$

この定数 c は正である。その理由は、 c を負にとる場合、 X が単調増加関数あるいは単調減少関数になり、材料の両端の境界条件を満たすことができない。具体的に、材料の両端 ($x = 0, L$) で温度を固定する。

$$\begin{aligned} T(0, 0) &= 0.0, \\ T(0, L) &= 0.0, \end{aligned} \quad (3.5)$$

この条件を満たす解は、

$$X_n(x) = \sin(n\omega x) \quad (3.6)$$

となる。但し、 $\omega = \sqrt{\frac{c}{\lambda}} = \frac{\pi}{L}$ とし、更に $t=0$ での温度分布が $U(x)$ である時、フーリエ展開によって、

$$B_n = \frac{2}{L} \int_0^L \sin(n\omega x) U(x) dx \quad (3.7)$$

を計算し、これを係数とする級数によって温度 $\mathcal{T}(t, x)$ は

$$\mathcal{T}(t, x) = \sum_{n=1}^{\infty} B_n e^{-\frac{n^2 \pi^2 \lambda}{L^2 C_v} t} \sin(n\omega x) \quad (3.8)$$

のように求められる。

一方、これをオイラー法で解くことを考えよう。熱伝導の偏微分方程式 (3.1) は、

$$C_v \frac{\mathcal{T}(t + \Delta t, x) - \mathcal{T}(t, x)}{\Delta t} = \lambda \frac{\mathcal{T}(t, x + \Delta x) - 2\mathcal{T}(t, x) + \mathcal{T}(t, x - \Delta x)}{(\Delta x)^2} \quad (3.9)$$

のように書きなおせる。これを $\mathcal{T}(t + \Delta, x)$ について解くと、

$$\mathcal{T}(t + \Delta t, x) = \mathcal{T}(t, x) + \frac{\lambda}{C_v} \frac{(\mathcal{T}(t, x + \Delta x) - 2\mathcal{T}(t, x) + \mathcal{T}(t, x - \Delta x)) \Delta t}{(\Delta x)^2} \quad (3.10)$$

を得る。 $\mathcal{T}(t, x)$ の配列を $T[i][j]$ 等で用意すれば、c 言語のプログラムを作成することができる。

第4章 Appendix: 面積積分の方法

Gauss 積分を行うときなど、面積積分が必要になる。

面積ベクトルは、面の法線方向にその面積 S の大きさを持ったベクトルである。

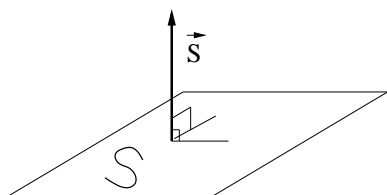


図 4.1: 面ベクトル

簡単な例をもとに面積積分を考えていこう。

4.1 (例1)

一辺が2の立方体 ABCDEFGH のガウス積分を考える。電場 \vec{E} は今簡単のため、一定の値

$$\vec{E} = (-2, 1, 3) \quad (4.1)$$

とする。立方体は、6面体であるから、6つの面があり、それぞれの面積の大きさは $2 \times 2 = 4$ である。それぞれ面積ベクトルは、

$$\begin{aligned} \vec{S}_{ABCD} &= (0, 0, 4), & \vec{S}_{EFGH} &= (0, 0, -4), & \vec{S}_{ABFE} &= (0, -4, 0), \\ \vec{S}_{CGHD} &= (0, 4, 0), & \vec{S}_{ADHE} &= (4, 0, 0), & \vec{S}_{BCGF} &= (-4, 0, 0) \end{aligned} \quad (4.2)$$

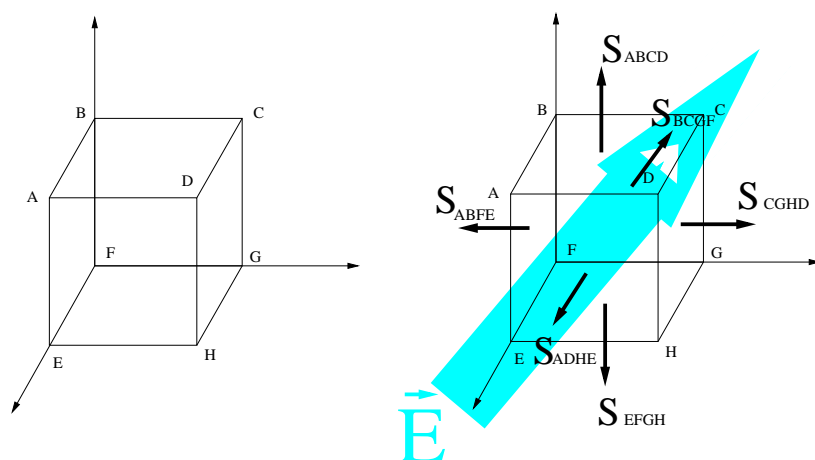


図 4.2: Gauss 面

となる。従って、ガウス積分は

$$\begin{aligned}
 \oint \vec{E} \cdot d\vec{S} &= \vec{S}_{ABCD} \cdot \vec{E} + \vec{S}_{EFGH} \cdot \vec{E} + \vec{S}_{ABFE} \cdot \vec{E} + \vec{S}_{CGHD} \cdot \vec{E} \\
 &+ \vec{S}_{ADHE} \cdot \vec{E} + \vec{S}_{BCGF} \cdot \vec{E} \\
 &= (0, 0, 4) \cdot (-2, 1, 3) + (0, 0, -4) \cdot (-2, 1, 3) + (0, -4, 0) \cdot (-2, 1, 3) \\
 &+ (0, 4, 0) \cdot (-2, 1, 3) + (4, 0, 0) \cdot (-2, 1, 3) + (-4, 0, 0) \cdot (-2, 1, 3) \\
 &= 0.
 \end{aligned} \tag{4.3}$$

この場合は、電場が一定であったため、全ての面に対して同じ電場を設定した。一般に面によって電場は異なるので、面を分割してそれぞれの面について内積を計算して和をとる必要がある。

4.2 (例2)

ガウス面が球面の時は、極座標を用いる。原点を球の中心に置くと、半径 r の球面上の座標は、

$$\begin{aligned}
 x &= r \sin \theta \cos \varphi, \\
 y &= r \sin \theta \sin \varphi, \\
 z &= r \cos \theta
 \end{aligned} \tag{4.4}$$

となる。 θ と φ の区間は、

$$\begin{aligned} 0 &\leq \theta \leq \pi \\ 0 &\leq \varphi \leq 2\pi \end{aligned} \quad (4.5)$$

従って、分割した小面積を θ と φ の範囲で指定できる。 $\{i, j\}$ でラベルした面 $S_{i,j}$ の区間は、

$$\theta_i \leq \theta \leq \theta_{i+1}, \quad \varphi_j \leq \varphi \leq \varphi_{j+1} \quad (4.6)$$

のように指定できる。ただし、 $\theta_0 = 0$ であり、 $\theta_{max} = \pi$, $\varphi_0 = 0, \varphi_{max} = 2\pi$ となる。この場合、面ベクトルの大きさは、 $S_{i,j}$ の面積であるから、 $r^2 \sin \theta_i (\theta_{i+1} - \theta_i) \cdot (\varphi_{j+1} - \varphi_j)$ である。よって、ベクトルの方向は動径方向 \vec{r} だから、面ベクトルは

$$\vec{S}_{i,j} = r^2 \sin \theta_i (\theta_{i+1} - \theta_i) \cdot (\varphi_{j+1} - \varphi_j) (\sin \theta_i \cos \varphi_j, \sin \theta_i \sin \varphi_j, \cos \theta_i) \quad (4.7)$$

となる。

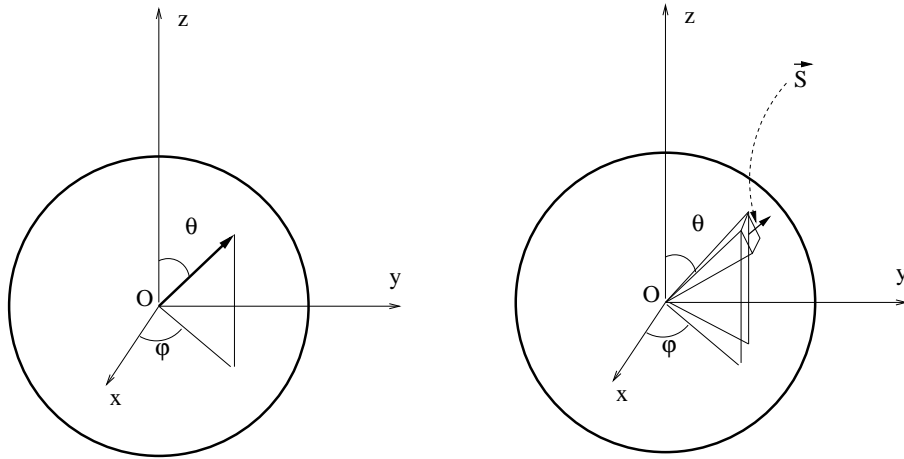


図 4.3: 面ベクトル