

金属中の軽い不純物粒子の量子状態

発表者: 平松壮太

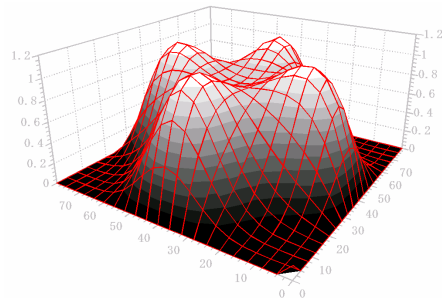
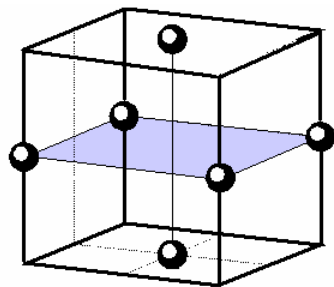
指導教官: 友寄友造

下図(左)のような体心構造を成す金属中の一部の空間に軽い不純物粒子を閉じ込めた系を考える。この系での不純物粒子の状態関数(波動関数)を関数として求めるのは難しい。そこで、最終的に求めたい現実的な状態をエネルギー的に安定なものだとすると、その現実的なエネルギーの変分は0となるということを手がかりに、任意のテスト関数を近似していき、現実に近い状態関数の形状とエネルギーの値を求めた。

(計算手順)

1. “仮想”状態関数である任意のテスト関数 ψ を決め、シュレーディンガー方程式より、仮想的なエネルギーの値 W を求める。
2. 少なくとも、この仮想的なエネルギー W の変分を0にするような新たな関数 ψ' を W/ψ という条件より求める。
3. ψ' を用いたシュレーディンガー方程式より新たに仮想的なエネルギー W' を求める
4. 少なくとも、この仮想的なエネルギー W' の変分を0にするような新たな関数 ψ'' を W'/ψ' という条件より求める。
5. ……

これを仮想エネルギーの値が収束するまで繰り返す。



上図(右)は上図(左)の影のついた面の状態関数(500回近似)の分布の様子。

上図(右)の底面四隅が上図(左)のイオン(黒丸)がある位置にあたる。なお、上図(右)の縦軸には状態関数の値が取られている(Z方向の分布は描かれていない)。

発表では上述の計算についての解説し、

状態関数のZ方向も含めた3次元空間での分布の様子を表示する予定。