

TF 基礎方程式の数值解

岡山大学計算機センター

川端 親雄

§ 1. 序

この取りあげた研究の内容は物理学、特に原子分子理論の研究の際に直面する非線型微分方程式、いわゆる Thomas-Fermi 基礎方程式を数値的に解く問題である。この方程式の物理的意味は原子内多電子問題を取扱うとき、一つの電子にたいして他の多くの電子の影響がその電子のガスの密度としてみおらわれるという考えで、電子の密度を統計力学によつて求めようというものである。この Thomas-Fermi 方程式の解を求める研究は電子計算機が利用された以前から、いろいろな研究者によつてなされてゐる。しかし、1954 年、フランスの L. Brillouin が推測してゐるパラメーターから出発した有限な領域で発散するであろうということは、まだ数値的に実証されてゐない。この TF 基礎方程式を詳細に調べるとは物理学、ならびに数値解析の研究上有意義である。

§ 2. Thomas-Fermi 基礎方程式とその数値解

Thomas-Fermi 基礎方程式は二階の非線型微分方程式で次の如くである。

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{\varphi^{3/2}}{x^{1/2}} \quad x > 0, \varphi > 0 \dots\dots (1)$$

$$\varphi(0) = 1 \quad \dots\dots\dots (2)$$

TF 基礎方程式の数値解のこれまで研究を要約すると、3種類に分類できる。 $x=0, \varphi(0)=1$ の点から出発して (1) の微分方程式を解くと 1 図に示すような傾向の解が得られる。第一に $x=0$ における傾きが

$$(I) \quad -\left(\frac{d\varphi}{dx}\right)_{x=0} = 1.58806 \dots\dots = B_0 \dots\dots (3)$$

であるような解は、 x の有限の値に対しては零とならず、且つ x が無限大に行くと零に行く。これは x の大きい値に対しては漸近的に次のようになる。

$$\varphi \rightarrow \left[\frac{1}{1 + \left(\frac{x}{12^{3/2}}\right)^{0.772}} \right]^{3.886} \rightarrow \frac{144}{x^3} \dots\dots (4)$$

第二に、この傾きが急な場合、すなわち

$$(II) \quad -\left(\frac{d\varphi}{dx}\right)_{x=0} > B_0 \quad \dots\dots (5)$$

の場合の解は x の有限の値 x_0 において零となる。
 第三にも、と傾きがゆるやかな場合、すなわち

$$(III) \quad -\left(\frac{d\phi}{dx}\right)_{x=0} < B_0 \quad \dots\dots\dots (6)$$

の場合には ϕ は $x = x_m$ で極小 $\phi_m (> 0)$ に達し、その後
 $x = a$ で $\propto a(x-a)^{-4}$ の形の無限大に向い、 $x > a$ には
 再び減少して $x \rightarrow \infty$ と共に零に行く。この場合は Brillouin
 のおくまで推測である。

いろいろの数値実験と電子計算機を利用して試みてみるので
 以下紹介する。

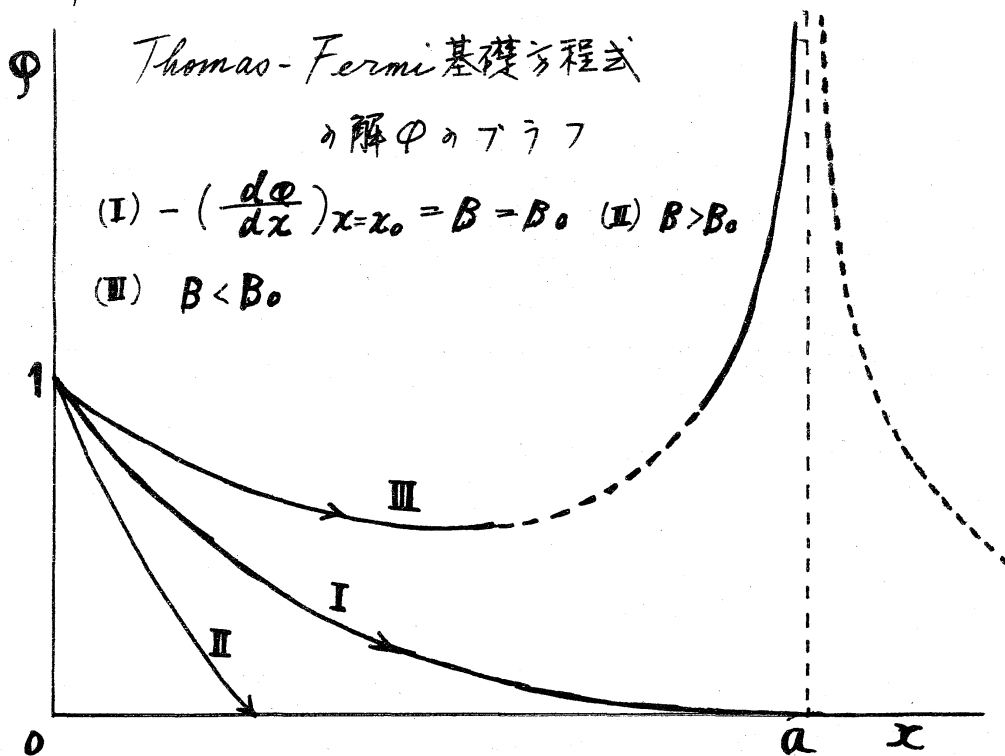


図 1

§ 3. 数値実験とその考察

このことは (III) の数値解を調べた場合には限らず議論する。
数値計算をするために以下のような種々の方法が考えられる。

A) $x=a$ の近傍から $\varphi = 400a(x-a)^{-4}$ を逆に級数展開して
最初の数項を求め、それらを出発点として Runge-Kutta 法
等で解く。

B) 右の TF 基礎方程式の逆関数 $\varphi = \frac{1}{\phi}$ をとり、 $x=a$
から原点に向って解く。

C) この関数 ϕ は下に凸であるから $\phi(x_0) = 0$ なる点 x_0 が
ある筈である。この点 x_0 がどこにあるかわからないが、適当
な点を仮定すれば $\varphi(x_0) = \varphi_0$, $\varphi'(x_0) = 0$ の初期値問題
となるからいろいろな φ_0 について両側に向って解く。

D) a を勝手に定めるとき $\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{\varphi^{3/2}}{x^{1/2}}$, $\varphi(0) = 1$, $\varphi(a) = \infty$
となるから境界値問題として解く。

E) $x=a$ で $\varphi \approx 400a(x-a)^{-4}$ の形で発散するから $\frac{1}{\varphi^{1/4}}$
を未知関数として解く。

F) a が $-\varphi'(0) = B$ に依存しているとすう。すなわち $a = F(B)$
これを B に関する方程式とみなして、一次逆補間法で解く。

G) 清水辰次郎先生の図解法で解く。

現在数値実験中であるがその結果は他の機会に紹介したい。

§ 4. 結語

この問題を最初に教示して下さいました岡山大学数理解物理研究室の富島康雄教授ならびに米井克己助教授、数理解析研究所の研究会でこの研究の促進のために大変有意義な討論と重要なコメントをして下さい、以下記の諸氏に深く謝意を表します。

慶応文・工	柳井裕
早文・理工	室谷義昭
阪大・工	島居達生
東京理文	清水辰次郎
熊本文・理	三好哲彦
京文数理解	一松信
京文数理解	森正武

参考文献

- 1) L. H. Thomas, Proc. Camb. Phil. Soc. 23 (1927), 42
- 2) E. Fermi, ZS. f. Phys., 48 (1928), 73
- 3) L. Brillouin, Bd. 160, Paris: Hermann Et Cie (1934)