

【序】

CIP(Cubic Interpolated Pseudo/Constrained Interpolation Profile)法は移流方程式

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f(\mathbf{r}, t) = 0$$

を少ないグリッドで精度よく計算するために考えられた補間法である。これまで多くの分野で用いられてきたスプライン補間やエルミート補間は、離散的な点を滑らかにつなぐことのみ重点を置いた方法であるが、CIP法はもとの関数の微分値を条件に用いることで、他の方法では再現が難しい条件化においても補間することが出来る。加えてスプライン補完等の方法では、離散点間の補完において煩雑な手続きを必要とするのに対し、CIP法では差分法程度の計算量によって補完可能とする利点もある。そのために、流体のシミュレーションにはもちろん近年ではレーザーなどの分野で広く使われるようになった。

近年、Wyattらによって提唱されたQTM(Quantum Trajectory Method)は、これまでの基底関数を用いた量子波束ダイナミクスに対し、計算コストを抑える方法の一つとして注目されている。しかし、有名なSplit-Operator法とは異なり、実空間のみで時間発展するQTMに対して安定で継続的な計算手法は確立されているとは言い難く、計算方法の改良が望まれている。QTMにおける基本運動方程式は理論に示すように流体力学形式との類似が多いため、上述したCIP法を用いるのに非常に適している。

本研究ではCIP法をQTMに適用した量子波束ダイナミクスシミュレーション(以下CIP-QTM)を障壁型ポテンシャル上で行い、CIP法を用いない場合との比較からQTMを解く上での有効性を議論する。

【理論】

1) CIP法

簡単のために一次元での二点 f_i と f_{i+1} の間にある点の補間を考える。条件として二点での値 f_i, f_{i+1} とその微分値 g_i, g_{i+1} が補間する関数 $F(x)=a(x-x_i)^3+b(x-x_i)^2+c(x-x_i)+d$ に等しいという四つの条件

$$F(x_i) = f_i, F(x_{i+1}) = f_{i+1}, \left. \frac{dF(x)}{dx} \right|_{x=x_i} = g_i, \left. \frac{dF(x)}{dx} \right|_{x=x_{i+1}} = g_{i+1}$$

から未知定数 a, b, c, d を求めると

$$a = \frac{g_i + g_{i+1}}{(x_{i+1} - x_i)^2} + \frac{2(f_i + f_{i+1})}{(x_{i+1} - x_i)^3}, b = \frac{3(f_{i+1} - f_i)}{(x_{i+1} - x_i)^2} - \frac{2g_i + g_{i+1}}{(x_{i+1} - x_i)}, c = g_i, d = f_i$$

となる。これらから補間点は $F(dx+x_i)=a(dx)^3+b(dx)^2+c(dx)+d$ 、微分値 $dF/dx|_{(dx+x_i)}=a(dx)^2+b(dx)+c$

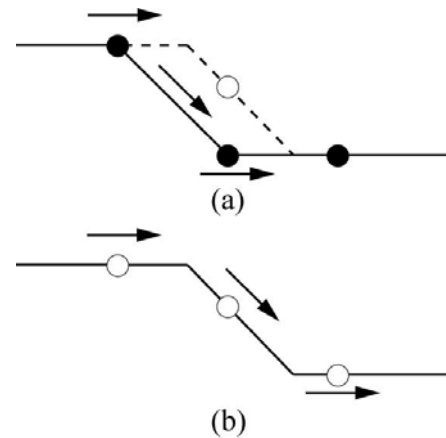


Fig.1 CIP法のイメージ

ある関数(aの実線)が速度 v で移流する(aの点線).CIP法は微分値(矢印)を使用しaの点線を再現するように離散点間を補間する(bの実線).

から得られる。

移流方程式はそのままの形を保ったまま速度 \mathbf{v} で移動するということを表す方程式である。QTM で示す(1),(2)のような右辺が0でない場合その項を非移流項と呼び拡散などに相当する変化を及ぼす項になる。CIP法ではこれらを分離し、非移流項は差分法など任意の方法を用いることで方程式を解くことができる。

2) QTM

時間依存のシュレディンガー方程式 $i\hbar\partial_t\psi = H\psi$ に極表示の波動関数 $\psi(\mathbf{r},t)=R(\mathbf{r},t)\exp\{iS(\mathbf{r},t)\}$ ($R,S\in\mathbf{R}$)を代入し、運動方程式の実数部・虚数部から以下の二方程式が得られる。

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \mathbf{v}\cdot\nabla\rho = -(\nabla\cdot\mathbf{v})\rho \quad \dots(1)$$

$$\frac{\partial\mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v}\cdot\nabla)\mathbf{v} = -\frac{\nabla}{m}\left(\frac{1}{2m\rho^{1/2}}\nabla^2\rho^{1/2} - V\right) \quad \dots(2)$$

ここで m は粒子の質量、 V はポテンシャルエネルギー、 $\rho = R^2$, $\mathbf{v} = \nabla S / m$ 。この連立方程式の左式は連続の方程式、右式は古典的 Hamilton-Jacobi 方程式に $-\nabla^2\rho^{1/2}/2m\rho^{1/2}$ という非局所ポテンシャルを追加した形になっている。QTMではこの項を量子ポテンシャルと呼び、古典系ダイナミクスに量子効果を取り入れることが可能となる。

【計算方法】

CIP-QTM を用いてトンネル効果に対する波束シミュレーションを行う。初期波動関数をガウス型波束 $\psi(x) = (2\beta/\pi)^{1/4} e^{-\beta(x-x_0)^2 + ik(x-x_0)}$ とし、波束の持つ初期運動量を変化させ障壁型ポテンシャル $V_{Ec}(x)=V_0\text{sech}^2(ax)$ ($V_0=0.1\text{a.u.}, a=0.5\text{a.u.}$)上で量子トラジェクトリ計算を行う。

【QTM を用いた結果】

Fig.2 に一次元の二重井戸型ポテンシャル上での基底を用いた量子波束ダイナミクスによるシミュレーション結果と同条件の QTM の結果を示す。障壁にぶつかり反射波と透過波に別れ始めるあたりから、障壁内部での波束の形に不一致がみられる。この結果から QTM が正確な解を再現できていないことがわかる。一般に QTM では node(節)の付近で再現性が悪くなる傾向がある。

CIP-QTM シミュレーションでの結果の詳細は当日報告する

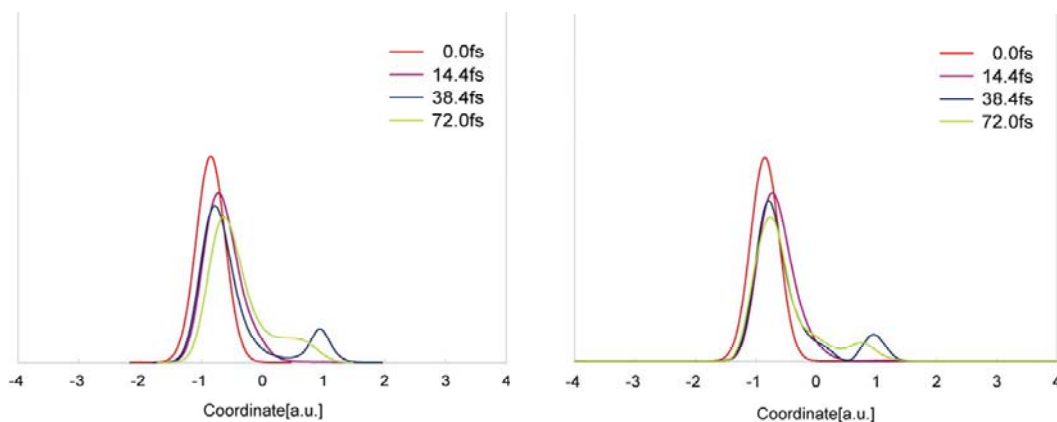


Fig.2 QTM(左)と基底を用いた量子波束ダイナミクス(右)での結果 (一次元二重井戸型ポテンシャル)