

## 量子拡散としての電子ダイナミクス

(豊橋技術科学大学) 関野秀男・浜田信二

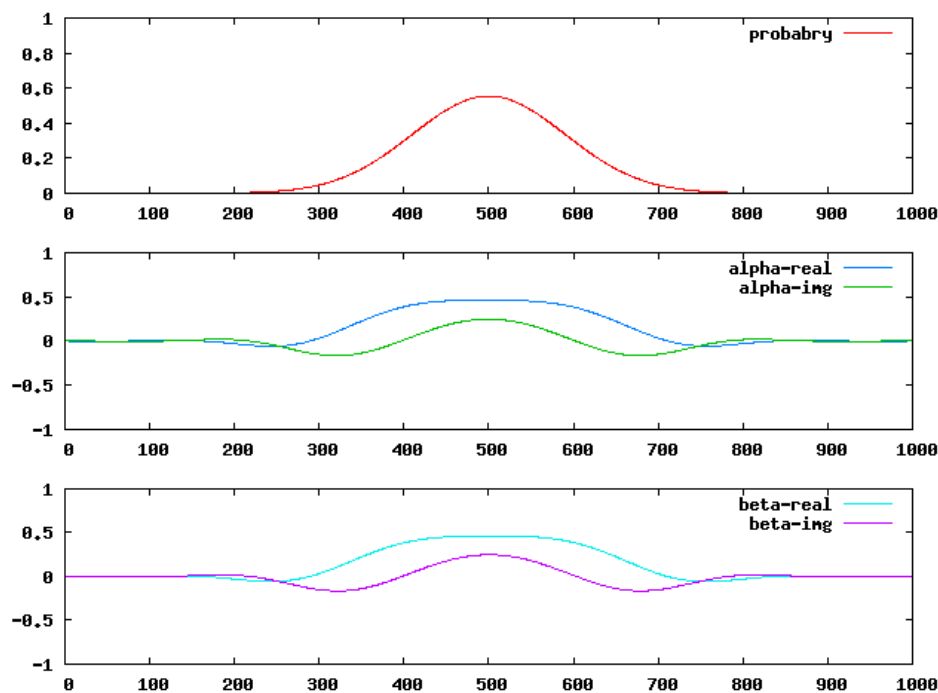
## Electron Dynamics as Quantum Diffusion

(Toyohashi University of Technology) Hideo Sekino, Shinji Hamada

## 【序論】

分子結合に深く関わる電子ダイナミクスは量子力学の法則に従っているが、その基本方程式である Schrödinger 方程式の解法にも解くべき電子状態の特性により種々の方法論が考案されている。本稿では確率保存と内部自由度の考慮を行うだけで時間依存 Schrödinger 方程式(TDSE) の帰結をその近似として得られる量子ウォーク法[1]に注目し、電子ダイナミクス数値解法の新しい方法論としての可能性を論じる。

光速よりずっと低い速度を持つ自由電子の挙動は運動エネルギー項のみをハミルトニアンと



する TDSE の解として与えられるが、同様の帰結は内部自由度を考慮した粒子の自由拡散の長波長限界として与えられる[2,3]。図1に実ガウシアン分布を初期関数として左右等確率で進む量子ウォークによる時間発展を示す。

図1 シンメトリック Schrödinger Quantum Walk (30000 時間ステップ)

隣接格子のみへの移動を許すウォークでは格子点の全体は奇数時間ステップと偶数時間ステップの2グループに分かれる。エネルギーの変化分と運動量の変化分との2次分散関係がある Schrödinger Quantum Walk では偶数あるいは奇数時間ステップのみを実際のステップとみなしてもよいが、数値算定に使う格子点は実際の物理空間の2倍となる。現実的な高次元空間への QW の拡張のためには内部自由度に対応するパリティの物理的考察がより重要となる。一般に  $m$  次元空間において単純な隣接格子へのウォークを考えれば1時間ステップごとに  $2^m$  格子点への移動を考慮することになるため、意味のある格子点の数に比べ数値算定に使う格子点の数は非常に大きくなる。

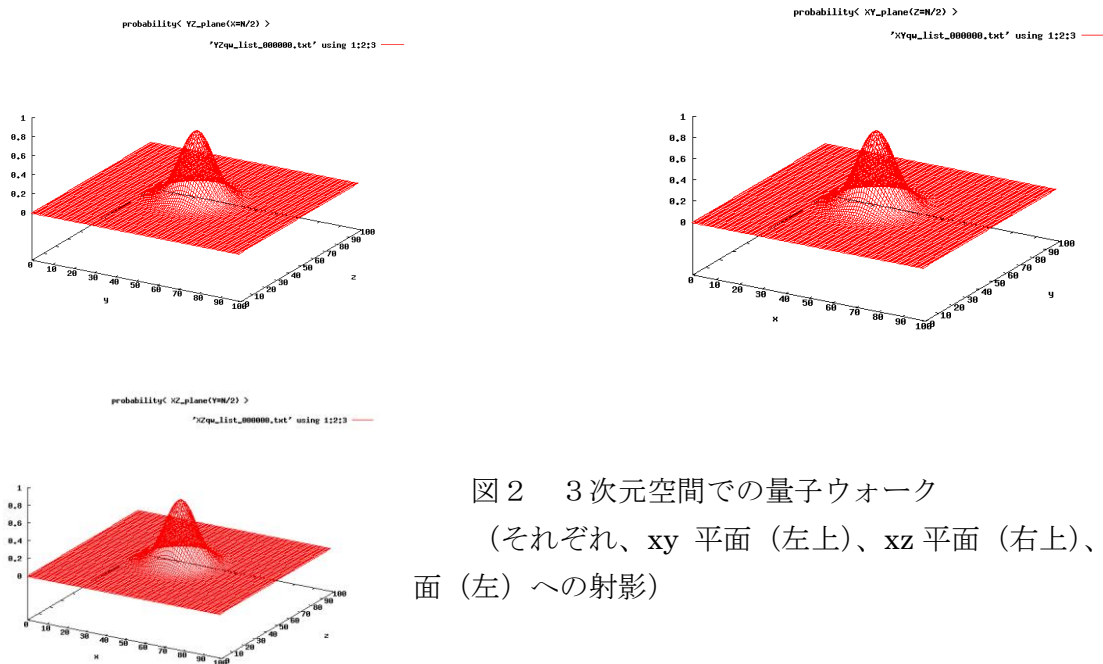


図2 3次元空間での量子ウォーク  
(それぞれ、xy平面(左上)、xz平面(右上)、yz平面(左)への射影)

我々は量子ウォークを一般的な拡散係数を有する拡散と解釈し、その連続極限で Schrödinger 方程式の解を与えることを示した。更に拡散係数が空間依存をする非均一系でのウォークについて考察し[3]、一般的な場での Schrödinger 方程式の数値解への QW 法の適用有効性を示した。

【参考文献】

[1] *Quantum Potential Theory: Structure and Applications to Physics* at the Alfred Krupp Kolleg Greifdwal, N.Konno, Quantum Walks (Sangyo Tosho 2008) Feb. 26- March 10, (2007)

[2] *A Solution of Time Dependent Schrödinger Equation by Quantum Walk*, Hideo Sekino, Masayuki Kawahata and Shinji Hamada, Physics Journal of Physics Conference Series, 352 012013, (2012)

[3] *Quantum walk with variable parameters*, Shinji Hamada, Masayuki Kawahata and Hideo Sekino, Journal of Quantum Information Science (2013)