

量子ポアソン方程式を用いた量子動力学シミュレーション

¹金沢大院・自然, ²九大先導研, ³金沢大・新学術
○杉澤宏樹¹, 堀優太², 井田朋智¹, 水野元博^{3,1}

Quantum Dynamics Simulation by Quantum Poisson Equation

○Hiroki Sugisawa¹, Yuta Hori², Tomonori Ida¹, Motohiro Mizuno^{3,1}

¹ Graduate School of Natural Science & Technology, Kanazawa Univ.

² Institute for Materials Chemistry and Engineering, Kyushu Univ.

³ Institute for Frontier Science Initiative, Kanazawa Univ.

【Abstract】 Bohm mechanics has attracted attention in recent years because it has various advantages that the general quantum wave-packet dynamics method does not have. However, it is known that the existence of the term "quantum potential" with ambiguous physical picture breaks the numerical calculation, and it is urgent to solve this problem. Therefore, in this research, we investigate the cause of failure of numerical calculation and propose approach to efficiently avoid this problem. In addition, we aim at deepening the understanding of time dependent quantum mechanics by giving a specific physical picture to the quantum potential. Finally, this picture was confirmed by comparing with exact solutions.

【序】 量子波束動力学法は動的な物理現象を厳密に予測できるため、量子効果が無視できないような系のシミュレーションに広く用いられている。その一方で、オーダー N 問題や境界問題といった数値計算特有の問題を有している。この問題を解決する取り組みの一つとして、Bohm 力学^[1,2]が提案されている。この方法では、波動関数を古典流体として取り扱うことができるため次の利点を有する^[3]: (1) 複素数を必要としない。(2) Lagrange 座標を導入することで境界問題が発生しない。(3) 計算コストが小さい。(4) 量子効果の根源といわれる“量子ポテンシャル”が可視化可能。しかし、物理描像があいまいな項“量子ポテンシャル”は、波束の干渉に対し非線形な部分を生じさせるため、数値計算を破たんさせるという大きな問題となり、Bohm 力学の一般化を妨げている。

よって、本研究では Bohm 力学に非圧縮性流体の粒子法^[4]を適応することで、数値計算の破たんを回避する手法を提案する。また、理論展開により導かれた量子ポテンシャルの Poisson 方程式が、量子力学に新たな描像を与える事を示し、量子ポテンシャルの曖昧さを取り除く。

【理論】 Bohm 力学は波動関数 $\psi = R \exp(iS/\hbar)$ を時間に依存する Schrödinger 方程式に代入し、実部と虚部に分離することで、

$$m \frac{\partial v}{\partial t} = -\nabla(Q_B + V) = f_q + f_c \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\rho \nabla v \quad (2)$$

ここで、 v は波束の速度で $v = \Delta S/m$ の関係を持ち、 ρ は確率密度である。また、 Q_B は Bohm の量子ポテンシャルと呼ばれ、

$$Q_B = -\frac{\hbar^2 \nabla^2 \sqrt{\rho}}{2m \sqrt{\rho}} \quad (3)$$

と表される。非圧縮性流体の粒子法ではまず、式(2)に次の条件を課す。

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = -\rho_i \nabla v = 0 \quad (4)$$

この条件により、各粒子の密度は時間によって変化せず、あたかも古典粒子のように振る舞う。この時、連続な密度情報が失われたように思われるが、粒子間の距離および粒子数がこの情報を担っているため、失われたわけでないことに注意してほしい。

次に、式(1)に注目すると量子力と古典力が完全に分離されている。そのため、量子ポテンシャルに対する Poisson 方程式を導出することが可能となり、露わに式(3)を解く必要がなくなる。さらに、影響半径を用いて一定距離以上離れた粒子の影響を無視することで、量子ポテンシャルの非線形性を緩和し、波の干渉による数値計算の破たんが回避できると予想される。また、量子ポテンシャル Q_B に対する Poisson 方程式と古典圧力 P に対する Poisson 方程式は非常に似た式構造をとっており、これを比較することで、非常に興味深い関係

$$P = \frac{\rho^0}{m} Q_B + C \quad (5)$$

が示唆される。ここで、 C は積分定数である。この関係式は、時間依存の量子力学に対し斬新な描像を与える。具体的な理論展開については、当日詳しく説明する。

【結果】 波束が干渉する最も初歩的な系として、1次元の散乱問題を取り扱う。初期 Gauss 波束は $\psi = (2\alpha/\pi)^{1/4} \exp(-\alpha(x-x_0)^2 + ip_0(x-x_0)/\hbar)$ とし、障壁として Gauss ポテンシャル $V = D \exp(-\gamma x^2)$ を用いた。ここで、Tannor^[5]が使用したパラメータ： $\alpha = 30\pi$ 、 $p_0 = 48.9$ 、 $x_0 = -0.7$ 、 $D = 40$ 、 $\gamma = 15.35$ 、 $m = 30$ を用い数値検証を実行した（単位は原子単位）。また、厳密解には固定グリッドの手法を使用した。Fig.1 は、反射波と透過波の割合をプロットした図であり、我々の方法と厳密な方法はおおむね一致した。したがって、数値計算破たんの回避および、量子ポテンシャルに対する Poisson 方程式の妥当性の検討の達成を一例について確認した。当日は、他の系についても議論する。

【参考文献】

- [1] D. Bohm, Phys. Rev. 85, 166 (1952).
- [2] D. Bohm, Phys. Rev. 85, 180 (1952).
- [3] Wyatt, Chem. Phys. Lett. 313, 189-197(1999).
- [4] Koshizuka S, Oka Y, Nucl. Sci. Eng. 123, 421(1996).
- [5] Y. Goldfrab; I. Degani; D. J. Tannor, J. Chem. Phys. 125, 231103 (2006).

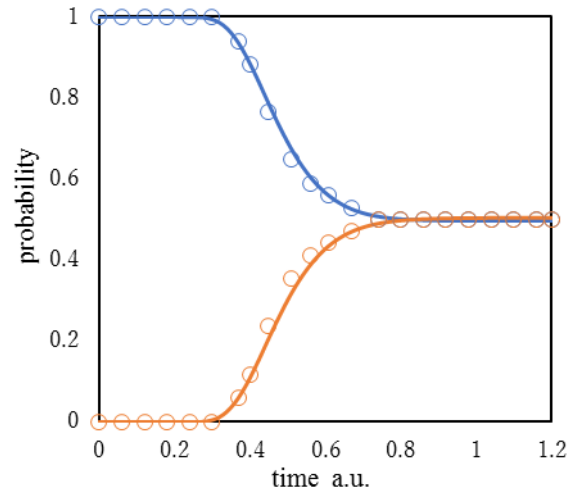


Fig.1 Time dependent transmission and reflection probability. Where blue line is exact transmission probability, yellow line is exact reflection probability, blue circle is new approach's transmission probability and yellow circle is new approach's reflection probability.