

2P062

ウェーブレットを用いた時間依存 HF/KS 方程式の時間領域解析

(豊橋技科大) 濱田信次、関野秀男

電子状態の時間領域シミュレーションの目的

(1)強いレーザーによる非線形光学応答

(2)量子輸送現象

など非線形効果が大きく、摂動計算での誤差が大きくなる場合は、時間領域で厳密に解く必要がある。

wavelet を使う目的

時間領域シミュレーションは、定常状態計算とくらべて非常に大きな計算コストが必要である。

したがって、定常状態の場合以上に効率的なアルゴリズムが求められる。

wavelet を用いる方法はそのような可能性のひとつである。

時間領域に限らず、wavelet は関数の非常に効率的な展開方法である。また、微分、convolution、指数演算子、関数の積などの効率的な計算アルゴリズムが知られている。

時間領域でも定常状態計算と同じく Gauss 型基底関数での展開は可能である。

しかし、Gauss 型基底関数などを使うと、つねに基底関数の不完全性の問題がつかまとう。特定の問題に対しては精度よく計算できるが、別の問題ではあまり良くないというようなことが起こり、その原因がどこにあるのかということとはなかなか把握できない。

これに対して、wavelet を使うと、原理的に基底関数の不完全性が存在せず、いくらでも正確に計算できる。

時間依存の場合は特にこのことが重要である。なぜなら、Gauss 型基底関数は定常状態計算、すなわち電子が核の近くに存在する場合に精度よく計算できるようにカスタマイズされている。これに対して wavelet は電子がどこにあるかということに関係なく精度よく計算できるので、時間依存計算向きである。

TDHF 方程式

密度行列表示
$$i \frac{\partial \hat{r}}{\partial t} = [\hat{F}(\hat{r}), \hat{r}]$$

波動関数表示
$$i \frac{\partial \Psi_i(t, x)}{\partial t} = \hat{F}(\hat{r}) \Psi_i(t, x) \quad (i = 0, 1 \dots N)$$

ELP 法

ELP(Exponential Linear Part)法とは、非線形時間発展方程式を解く際に、線形部分のみを厳密に取り扱う方法である。

A New Class of Time Discretization Schemes for the Solution of Nonlinear PDEs

G.Beylkin, J.M.Keiser, and L.Vozovoi, J. Comput. Phys. 147 362(1998)

以下の非線形微分方程式を考える。

$$\frac{d\Psi}{dt} = L\Psi + N[\Psi]$$

ここで L は linear operator, N は non-linear operator である。

これを積分形に直すと、ある時刻 t0 から t への時間発展は

$$\Psi(t) = \exp(L(t-t_0))\Psi_0 + \exp(Lt) \int_{t_0}^t \exp(-Lt') N[\Psi(t')] dt'$$

の形に書ける。ELP 法では時間 step $\Delta t = t - t_0$ で時間発展させていくが、線形部分 $\exp(L(t-t_0))\Psi_0$ は厳密に計算し、非線形部分は quadrature 計算を行う。

1次元での TDHF の計算例 (核 + 2 電子系、線形 Potential)

$$H = \sum_{i=1}^Z \left(\frac{1}{2} p_i^2 + Z |x_i| \right) - \sum_{i < j} |x_i - x_j| \quad \text{実際には Scale 変換、並進を行い}$$

$$H = \sum_{i=1}^Z \left(\frac{1}{2s} p_i^2 + \sqrt{s} |x_i - 0.5| \right) - \sum_{i < j} \frac{\sqrt{s}}{Z} |x_i - x_j| \quad (0 < x_i < 1)$$

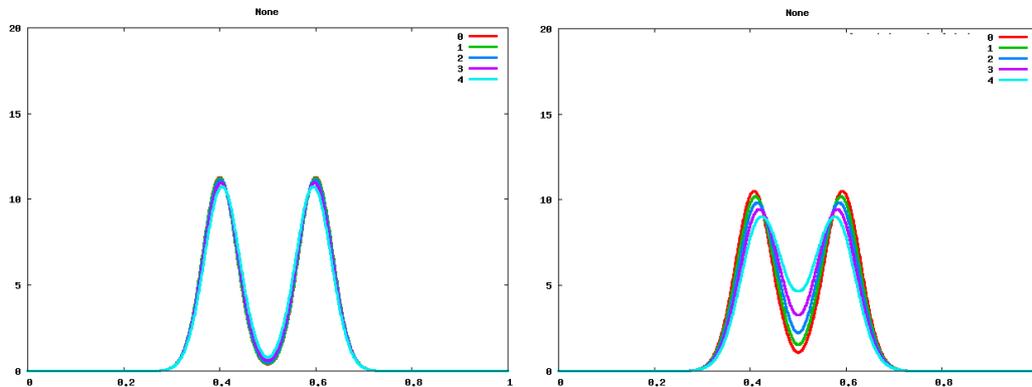
を解いた。(s=1000, Z=2 とした)。初期波動関数は

$$\Psi(x_1, x_2, t=0) = \text{Asym}[\exp(-200 \cdot (x_1 - 0.6)^2) \exp(-200 \cdot (x_2 - 0.4)^2)] \text{としている。}$$

なお、ELP 法を適用する際に、Fock 演算子の作用

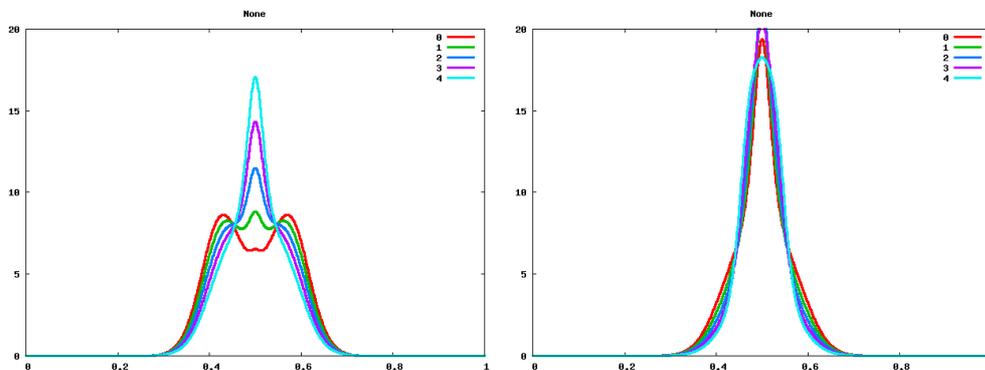
$$\begin{aligned} [\hat{F}\Psi_i](x) = & \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \Psi_i(x) \\ & + \int W(x-y) \mathbf{r}(y) dy \Psi_i(x) - \sum_j \int W(x-y) \Psi_j(x) \Psi_j^*(y) \Psi_i(y) dy \end{aligned}$$

において、第 1 項を Linear Part, 第 2 (Coulomb), 第 3 (Exchange) を Non-Linear Part として取り扱った。(V(x)/Z = W(x) = |x|) 以下、simulation の最初の部分である。



t=0.0 ~ 1.0 dt=0.2

t=1.0 ~ 2.0 dt=0.2



t=2.0 ~ 3.0 dt=0.2

t=3.0 ~ 4.0 dt=0.2

なお、現実の 3次元での計算結果については当日報告予定である。