2P063

Multiwavelet 基底における時間依存 Schrodinger 方程式の解法

（豊橋技術科学大学[1]，JST-CREST[2]）

○佐野直樹[1]，関野秀男[1,2]，浜田信次[1,2]，前田康行[1,2]

【序】近年のコンピュータ性能向上に伴い，定常状態の量子シミュレーションが実用レベルに近づいているが，量子状態の時間発展を厳密に表せるシミュレーションでは定常状態では現れない困難を克服しなければならない．第一原理計算では，対象とする系の Schroedinger 方程式を解くことに帰着するが，系の時間発展をシミュレーションするには次式で示される TDSE(時間依存 Schrodinger 方程式)を解くことになる．

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(r,t)=\hat{H}\psi(r,t)$$

TDSE の形式解は

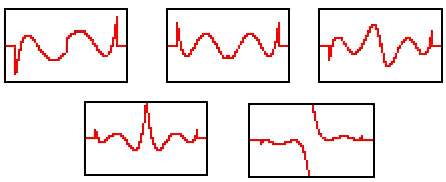
$$\psi(x,t+\Delta t)=\exp\left[-i\hat{H}\Delta t\right]\psi(r,t)$$

で表される．TDSE を安定して解くには粒子の存在確率を表す波動関数のノルムを常に厳密に 1 に保たなければならない．つまり時間発展演算子が厳密にユニタリでなくてはならない．これは下式で表される Cayley 形式を用いることで解決できる．

$$\exp\left[i\hat{H}\Delta t\right]\cong\frac{1+i\hat{H}\Delta t/2}{1-i\hat{H}\Delta t/2}$$

Cayley 形式は陰的性質を持つので，精度，安定性に優れている．さらに陰的でありながら反復計算が不要である．また指数積展開法を用いることでさまざまな条件に柔軟に対応できる．

TDSE を解くには波動関数をガウス型基底関数等で展開するかグリッド型の手法(差分法, 有限要素法)を用いるのが一般的である．しかし TDSE においてガウス型の手法では，電子雲が核近傍から離れると記述効率が悪くなることが多いため，グリッド型の手法がよくもちいられる．我々は両手法の長所を兼ね備えた wavelet 基底での展開法を用いた．多重解像度解析では空間を階層的に分割し，その差空間を wavelet として定義する．それぞれの解像度に対応する空間は Legendre 多項式を基底関数に選ぶことによって表現する．例えば 1 次元に対して位数($k=5$)の時の Multiwavelet 基底は次図のように表せる．



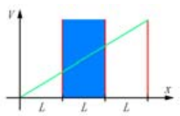
Multiwavelet 基底は複雑な波形の表現に適しており量子波束の表現のような微細な信号の時間

発展を追うには最適と思われる．

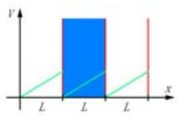
【シミュレーション例】

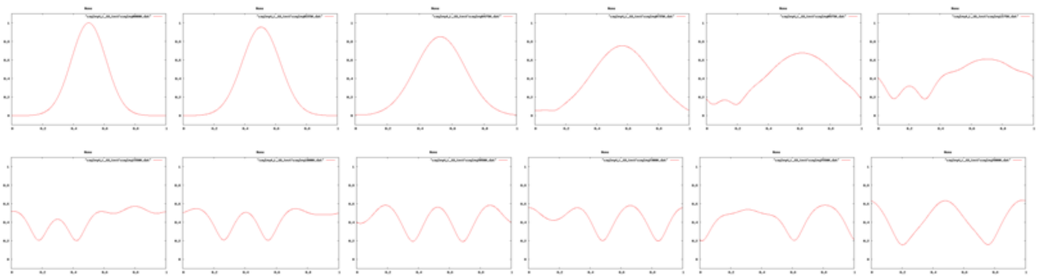
［例１］　ねじれた周期境界条件の下で外場を受けた１次元の量子波束の時間発展を示す．時間経過に伴い局在していた量子波束が，散乱的に拡散していく様子がわかる．ねじれた周期境界条件とは周期的メゾ系に外部電場を与えるにあたり，周期的でないポテンシャルを擬似的に周期ポテンシャルとして扱う手法である．左図の電場を与えるには，右図の電場で対応する．

与える外部電場

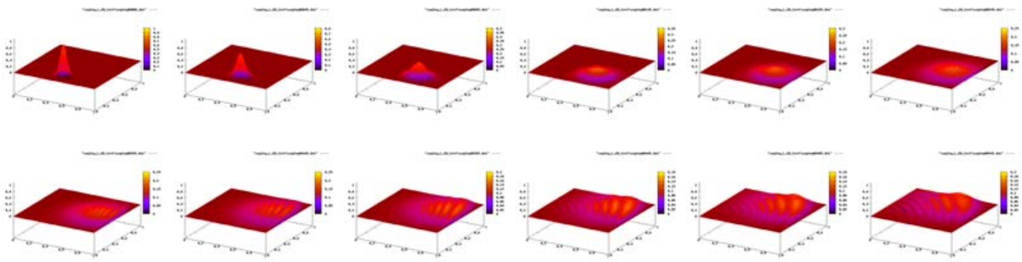


計算で用いる電場





［例２］　２次元空間で表現された波束に磁場をかけた時の様子をシミュレーションする．磁場を回り込むように拡散していく様子が見られる．下図シミュレーションは零境界条件の下で行われている．



【結果と考察】

波動関数を wavelet 基底で展開し，安定的に時間発展させることに成功した．１次元，２次元で電場，磁場を与えたシミュレーションを行い，波束の時間発展を可視化した．周期境界条件以外の境界条件を取り入れ束縛された状態での波束の時間発展をシミュレーションした．

【参考文献】

[1] Fast and stable method for simulating quantum electron dynamics, Naoki Watanabe and Masaru Tsukada

[2] Adaptive solution of partial differential equations in multiwavelet bases, B.Alpert , G.Beylkin,D.Gines, and L.Vozovoi

[3]Efficient algorithm for TD-Schrodinger equation and TD-Kohn-Sham equation, Naoki Watanabe, Masaru Tsukada