

目次

第1章 序論

1.1 背景

1.2 目的

第2章 原理

2.1 split-operator method

2.2 スプリットオペレータ-アダムス・バッシュフォース(SO-AB)法

第3章 結果及び考察

3.1 split-operator 法の誤差の評価

3.1.1 $X=0$

3.1.2 $X=1$

3.2 非斉次と見立てたシュレディンガー方程式

3.2.1 $-x+0.5$

3.2.2 $x+0.5$

第4章 結論

謝辞

参考文献

第1章 序論

1.1 研究の背景

原子を用いた量子力学的高次高調波発生過程は非斉次のシュレディンガー方程式によって記述される.非斉次のシュレディンガー方程式とは,次数が異なるシュレディンガー方程式で,外力が加わった際のシュレディンガー方程式として記述することができる.これまで1次元系のデルタ関数型のモデル原子について半解析的な研究が行われた[1].しかし一般的なポテンシャルの3次元の系について数値的に計算することはできていない.

1.2 研究の目的

本研究では時間依存の非斉次のシュレディンガー方程式を数値的に解く準備として,時間依存の斉次のシュレディンガー方程式を変形し,非斉次のシュレディンガー方程式と見立てたものを考える.スプリットオペレーター(SO)法とアダムス・バッシュフォース(AB)法を組み合わせたSO-AB法[2]により,この方程式を数値的に解いてその収束性を調べることを目的とする.

第2章 原理

2.1 split-operator method

Split-Operator Method (Split-Step Method とも呼ばれる) は量子研究において,特に非線形のシュレディンガー方程式を扱う際に広く使われている手法である.以下のようなシュレディンガー方程式を考える.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.1)$$

ここでハミルトニアンを実空間 (式(1.2)) と運動量空間 (式(1.3)) の2つに分割する.

$$\hat{H}_r = [V(\mathbf{r})] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.2)$$

$$\hat{H}_k = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.3)$$

ここで一般解として次式を仮定する.

$$\Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \left[e^{-\frac{i\hat{H}\Delta t}{\hbar}} \right] \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[e^{-\frac{i(\hat{H}_r + \hat{H}_k)\Delta t}{\hbar}} \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.4)$$

ベイカー・キャンドル・ハウストルフの公式を用いると次式を得られる.

$$\Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \left[e^{-\frac{i\hat{H}_r \Delta t}{\hbar}} e^{\frac{i\hat{H}_k \Delta t}{\hbar}} e^{-\frac{[i\hat{H}_r, i\hat{H}_k] \Delta t^2}{2}} \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.5)$$

ここで誤差を小さくするために位置空間で計算する項を2つに分割する Strang Splitting と呼ばれる過程を用いて次式のように変形する.

$$\Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \left[e^{-\frac{i\hat{H}_r \Delta t}{2\hbar}} e^{\frac{i\hat{H}_k \Delta t}{\hbar}} e^{-\frac{i\hat{H}_r \Delta t}{2\hbar}} \right] \Psi(\mathbf{r}, t) + \mathcal{O}(\Delta t^3) \quad (1.6)$$

ここで, 計算機でフーリエ変換を行うアルゴリズムである高速フーリエ変換(FFT)を使う. ある関数 $f(x)$ をフーリエ変換, 逆フーリエ変換することを $\mathcal{F}[f(x)], \mathcal{F}^{-1}[f(x)]$ と表すと,

$$\Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \left[\hat{U}_r \left(\frac{\Delta t}{2} \right) \mathcal{F}^{-1} \left[\hat{U}_k(\Delta t) \mathcal{F} \left[\hat{U}_r \left(\frac{\Delta t}{2} \right) \Psi(\mathbf{r}, t) \right] \right] \right] \Psi(\mathbf{r}, t) + \mathcal{O}(\Delta t^3) \quad (1.7)$$

ただし,

$$\hat{U}_r = e^{-\frac{i\hat{H}_r \Delta t}{\hbar}} \quad (1.8)$$

$$\hat{U}_k = e^{\frac{i\hat{H}_k \Delta t}{\hbar}} \quad (1.9)$$

とする. これを計算機によって計算する.

2.2 スプリットオペレーターアダムス・バッシュフォース(SO-AB)法

先行研究[2]では IFAB2 と呼ばれている. ここでは SO-AB 法と呼ぶ. SO-AB 法により

$$\frac{d\psi}{dt} = H_0 \psi + \mathbf{N}(\psi, t) \quad (1.10)$$

において

$$\phi(x, t) = e^{iH_0 t} \psi(x, t) \quad (1.11)$$

$$i \frac{d}{dx} \psi(x, t) = [H_0 + x \sin(ct)] \psi(x, t) \quad (1.12)$$

とし, 式(1.11)を式変形すると

$$\psi(x, t) = e^{-iH_0 t} \phi(x, t) \quad (1.13)$$

となり, これを(1.12)に代入すると

$$i \frac{d}{dt} \phi(x, t) = \{2H_0 \phi + x \sin(ct)\} \phi(x, t) \quad (1.14)$$

$$= \{2H_0 \phi + x \sin(ct)\} e^{iH_0 t} \psi(x, t) \quad (1.15)$$

$$= e^{iH_0 t} \mathbf{N}(e^{-iH_0 t} \phi, t) \quad (1.16)$$

と表すことができる. 先行研究では e^{-iH_0t} であったが, 本研究では e^{iH_0t} とした.

式(1.16)の両辺を $t_n \sim t_{n+1}$ の範囲で積分すると,

$$\phi(x_n, t_{n+1}) - \phi(x_n, t_n) = - \int_{t_n}^{t_{n+1}} i\Delta t x_n \sin(ct_n) \phi(x_n, t_n) dt \quad (1.17)$$

$$\phi(x_n, t_{n+1}) = \phi(x_n, t_n) - \int_{t_n}^{t_{n+1}} i\Delta t x_n \sin(ct_n) \phi(x_n, t_n) dt \quad (1.18)$$

となる.

Adam-Bashforth method は次式で与えられる.

$$y_{n+1} = y_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(y, t) dt \quad (1.19)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{\Delta t}{2} [3f(y_n, t_n) - f(y_{n-1}, t_{n-1})] \quad (1.20)$$

$$\Delta t = t_n - t_{n-1} \quad (1.21)$$

式(1.18)は Adam-Bashforth method を用いて

$$\Psi_{n+1} = e^{-iH_0\Delta t} \Psi_n - \frac{3i\Delta t}{2} e^{-iH_0\Delta t} N(\Psi_n, t_n) + \frac{i\Delta t}{2} e^{-2H_0\Delta t} (\Psi_{n-1}, t_{n-1}) \quad (1.22)$$

と記述される. これは Δt^3 の誤差を持つ.

これを運動量空間と位置空間の関数に分け, 計算機を用いて高速フーリエ変換を用いて計算する.

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} x^2 \right] \Psi(x, t) \quad (1.23)$$

式(1.23)の解析解は

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \exp \left[-\frac{\{x - X \cos(t)\}^2}{2} - i \left\{ Xx \sin(t) - \frac{X^2 \sin(2t)}{4} + \frac{t}{2} \right\} \right] \quad (1.24)$$

で与えられる. X は波動関数の初期値から決まる値である.

3 章 結果及び考察

3.1 split-operator 法の誤差の評価

式(1.23)で示される波動関数において任意の定数 X の値を変化させ, 計算解と解析解について相対誤差を評価した. ここで

$$\Psi(x, 0) = N \exp \left\{ -\frac{1}{2} (x - X)^2 \right\} \quad (1.25)$$

$$N = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right) \quad (1.26)$$

とした.

3.1.1 $X=0$

$X=0$ のとき, Δt を変化させた時各経過時間における実部と虚部の相対誤差は次のようになった.

表 1.各経過時間における Δt と実部及び虚部の相対誤差

	経過時間	Δt			
		$\pi/20$	$\pi/40$	$\pi/80$	$\pi/160$
実部の誤差	0.157079632679489	0.000050212024926	0.000012534208391	0.000003132381096	0.000003132381096
	0.314159265358979	0.000193808285340	0.000048370054161	0.000012087403806	0.000012087403806
	0.471238898038468	0.000410335563436	0.000102379977818	0.000025582292793	0.000025582292793
	0.628318530717958	0.000667869570754	0.000166576911804	0.000041619912623	0.000041619912623
	0.785398163397447	0.000926064424508	0.000230894092612	0.000057684804860	0.000057684804860
	0.942477796076936	0.001140029377629	0.000284164136816	0.000070988563725	0.000070988563725
	1.099557428756420	0.001264649263822	0.000315194550012	0.000070988563725	0.000078738421718
	1.256637061435910	0.001258878243856	0.000313820676746	0.000078399215222	0.000078399215222
	1.413716694115400	0.001089476410235	0.000271808773662	0.000067917234950	0.000067917234950
	1.570796326794890	0.000733628631232	0.000183479477809	0.000045874170530	0.000045874170530
虚部の誤差	0.157079632679489	-0.001967616333279	-0.000490950932207	-0.000122678359194	-0.000122678359194
	0.314159265358979	-0.001698425723880	-0.000423677613607	-0.000105861554524	-0.000105861554524
	0.471238898038468	-0.001274937543196	-0.000317904735618	-0.000079424527666	-0.000079424527666
	0.628318530717958	-0.000732556208874	-0.000182541540119	-0.000045598201672	-0.000045598201672
	0.785398163397447	-0.000116353359193	-0.000028889677759	-0.000007210072406	-0.000007210072406
	0.942477796076936	0.000522995611291	0.000130396953467	0.000032577332754	0.000032577332754
	1.099557428756420	0.001133828491037	0.000282474141872	0.000070557402725	0.000070557402725
	1.256637061435910	0.001668239731631	0.000415480099543	0.000103771798603	0.000103771798603
	1.413716694115400	0.002086482194590	0.000519605392566	0.000129776047041	0.000129776047041
	1.570796326794890	0.002360567340017	0.000587955168819	0.000146852766203	0.000146852766203

次に Δt と相対誤差の両対数グラフを取り, $y = x^2$ と比較した.

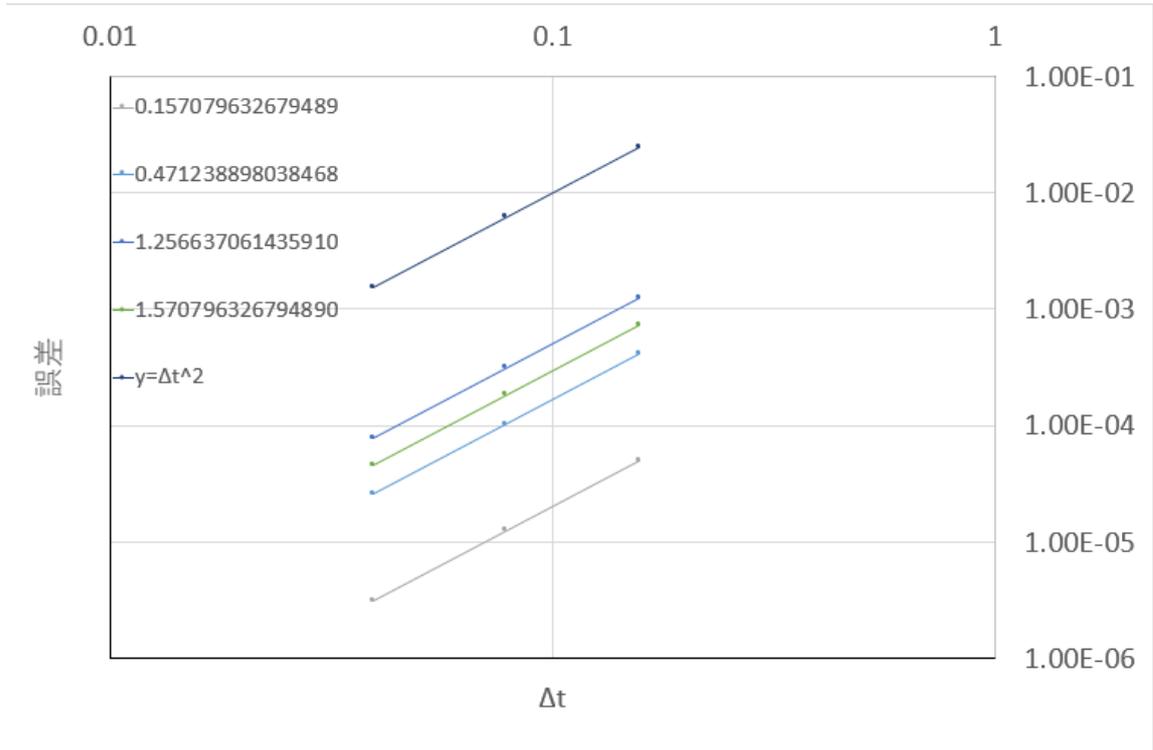


図 1.実部における Δt と相対誤差の両対数グラフ

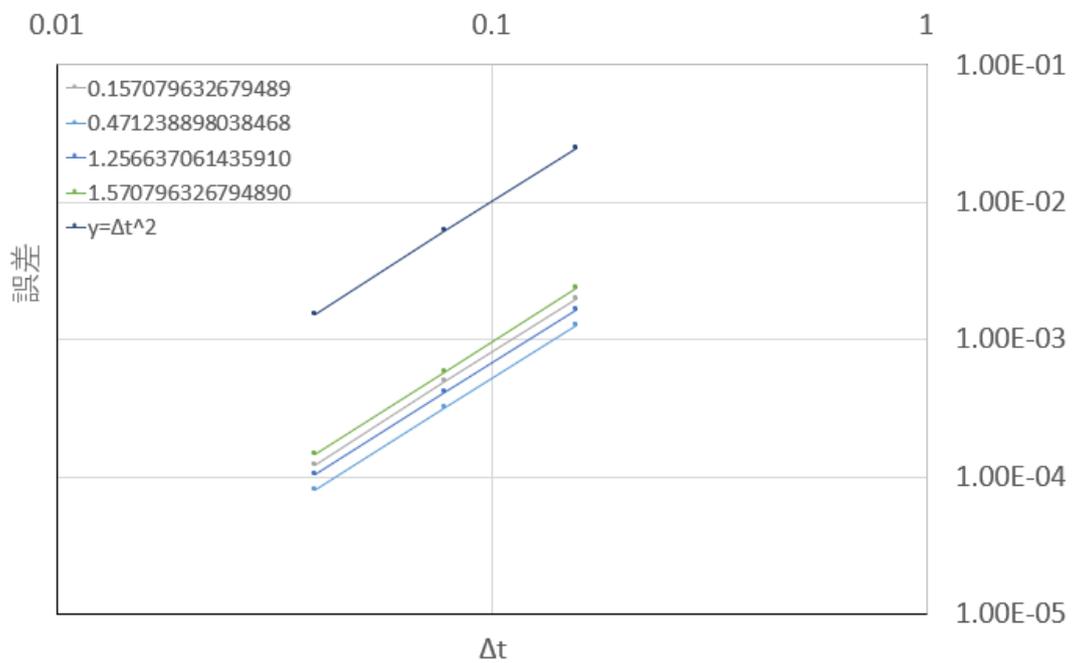


図 2.虚部における Δt と相対誤差の両対数グラフ

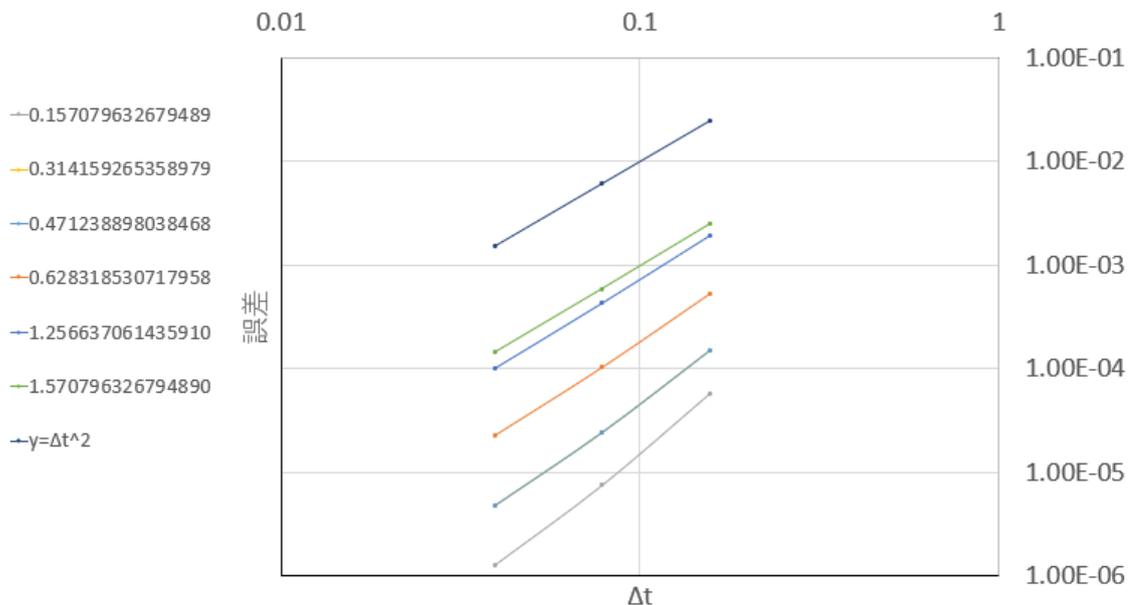
3.1.2 $X=1$

$X=1$ のとき, Δt を変化させた時,各経過時間における複素関数の相対誤差は次のようになった.

表 2.各経過時間における Δt と複素関数の相対誤差

経過時間	Δt			
	$\pi/20$	$\pi/40$	$\pi/80$	$\pi/160$
0.157079632679489	5.778799097634E-05	7.608791983735E-06	1.292844659784E-06	2.604006813539E-07
0.314159265358979	1.515528734392E-04	2.435412631982E-05	4.744384259683E-06	1.038029175441E-06
0.471238898038468	3.087915641960E-04	5.533435048631E-05	1.151516252771E-05	2.613799870470E-06
0.628318530717958	5.355912313531E-04	1.031786183280E-04	2.238481491992E-05	5.196544633470E-06
0.785398163397447	8.276889818518E-04	1.681194288512E-04	3.756994236356E-05	8.859839925332E-06
0.942477796076936	1.170244566925E-03	2.477411215455E-04	5.663112258380E-05	1.351452316733E-05
1.099557428756420	1.539049893560E-03	3.371273320054E-04	7.848820424975E-05	1.890964081838E-05
1.256637061435910	1.903006696365E-03	4.293377928701E-04	1.015209752493E-04	2.465519460897E-05
1.413716694115400	2.227622705308E-03	5.161553621744E-04	1.237404670987E-04	3.026299052767E-05
1.570796326794890	2.479112313892E-03	5.890187026462E-04	1.430112045760E-04	3.520083806480E-05

次に Δt と相対誤差の両対数グラフを取り, $y = x^2$ と比較した.

図 3. 複素関数における Δt と相対誤差の両対数グラフ

グラフが $y = x^2$ と平行であることから X の値に関係なく,計算解と解析解の相対誤差は Δt^2 に比例すると考えられる.

3.2 非斉次と見立てたシュレディンガー方程式

SO-AB 法によりシュレディンガー方程式を計算機を用いて求めた.

まず,非同時の項を入れて計算を行った.

3.1.1 $-x+0.5$

非同時の項 $-x+0.5$ を入れた時間依存シュレディンガー方程式とその解析解は次式で記述される.

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} x^2 - x + \frac{1}{2} \right] \Psi(x, t) \quad (1.27)$$

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \exp \left[-\frac{\{x-1+\cos(t)\}^2}{2} - i \left\{ -(x-1) \sin(t) - \frac{\sin(2t)}{4} + \frac{t}{2} \right\} \right] \quad (1.28)$$

この時, Δt を変化させ計算解と解析解の相対誤差について, 調べると次のようになった.

表 3.各経過時間における相対誤差

Δt	$\pi/20000$	$\pi/40000$	$\pi/160000$	$\pi/2560000$
経過時間				
3.15730062E-02	1.59457645E-04	7.97283841E-05	1.99320768E-05	1.24686362E-06
6.29889327E-02	1.59687981E-04	7.98431236E-05	1.99607644E-05	1.25012874E-06
9.44048592E-02	1.60068930E-04	8.00331681E-05	2.00082482E-05	1.25404274E-06
1.25820786E-01	1.60597926E-04	8.02972405E-05	2.00742228E-05	1.25881656E-06
1.57236712E-01	1.61271442E-04	8.06335815E-05	2.01582628E-05	1.26465893E-06
1.88652639E-01	1.62085039E-04	8.10399752E-05	2.02598194E-05	1.27161826E-06
2.20068565E-01	1.63033440E-04	8.15137853E-05	2.03782384E-05	1.27973257E-06
2.51484492E-01	1.64110600E-04	8.20519917E-05	2.05127633E-05	1.28892062E-06
2.82900418E-01	1.65309799E-04	8.26512338E-05	2.06625488E-05	1.29903893E-06
3.14316345E-01	1.66623724E-04	8.33078577E-05	2.08266823E-05	1.31003985E-06

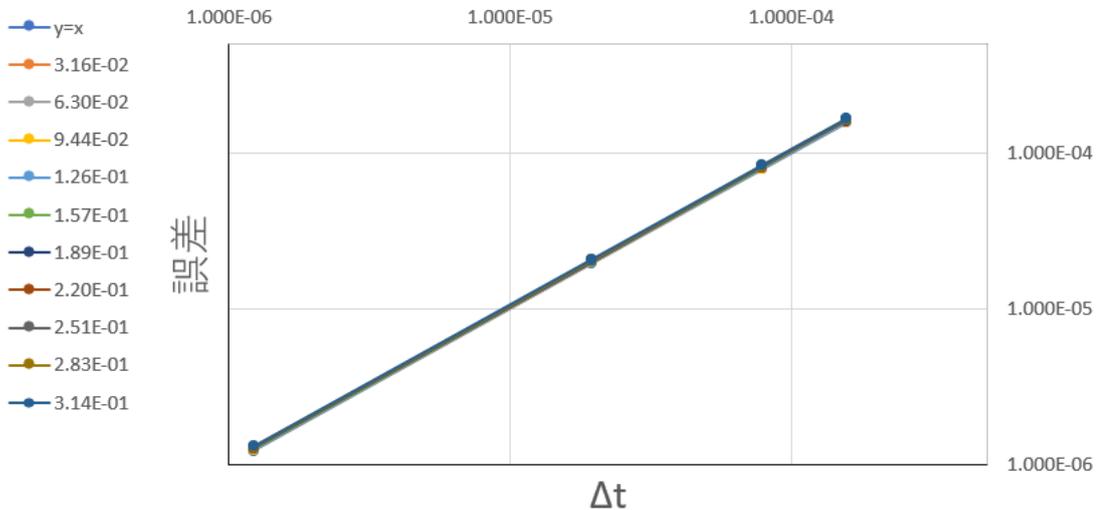


図 4.非同次の項が $-x+0.5$ の時の Δt と相対誤差の関係

3.1.2 $x+0.5$

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} x^2 + x + \frac{1}{2} \right] \Psi(x, t) \quad (1.29)$$

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \exp \left[-\frac{\{x+1-\cos(t)\}^2}{2} - i \left\{ (x+1) \sin(t) - \frac{\sin(2t)}{4} + \frac{t}{2} \right\} \right] \quad (1.30)$$

この時, Δt を変化させ計算解と解析解の相対誤差について, 調べると次のようになった.

表 4.各経過時間における相対誤差

Δt	$\pi/20000$	$\pi/40000$	$\pi/160000$	$\pi/2560000$
経過時間				
3.15730062E-02	1.54860259E-04	7.74296806E-05	1.93573992E-05	1.21095019E-06
6.29889327E-02	1.55097413E-04	7.75478184E-05	1.93869352E-05	1.21428280E-06
9.44048592E-02	1.55489599E-04	7.77434712E-05	1.94358194E-05	1.21829132E-06
1.25820786E-01	1.56034112E-04	7.80152917E-05	1.95037291E-05	1.22318343E-06
1.57236712E-01	1.56727232E-04	7.83614252E-05	1.95902152E-05	1.22917246E-06
1.88652639E-01	1.57564287E-04	7.87795386E-05	1.96946998E-05	1.23631524E-06
2.20068565E-01	1.58539726E-04	7.92668595E-05	1.98164958E-05	1.24465783E-06
2.51484492E-01	1.59647202E-04	7.98202160E-05	1.99548084E-05	1.25410889E-06
2.82900418E-01	1.60879668E-04	8.04360848E-05	2.01087499E-05	1.26450022E-06
3.14316345E-01	1.62229472E-04	8.11106411E-05	2.02773633E-05	1.27574840E-06

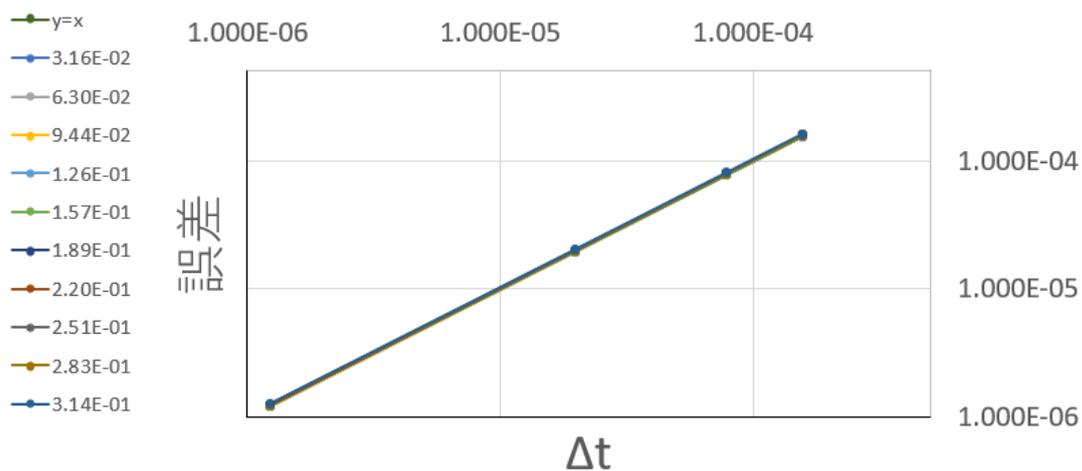


図 5.非同次の項が $x+0.5$ の時の Δt と相対誤差の関係

以上より非同次の項を挿入すると, Δt と相対誤差の両対数グラフは $y = x$ の傾きとほぼ等しいのでその誤差はおおむね Δt に比例しているとわかった.

第 4 章 結論

スプリットオペレーター法は Δt^2 の誤差を持っており, アダムス・バッシュフォース法も今回の計算で使用した項において Δt^2 の誤差を持っていることから, 非同次の項として $x+0.5$ や $-x+0.5$ を挿入して時間依存シュレディンガー方程式の数値計算を行うと Δt^2 の誤差が出ると予測されたが, 実際には Δt に比例した誤差を持つことが確認された.

謝辞

指導教官の森下亨教授からは,量子力学のご教授や研究を進めるためのプログラムの作成等,多岐にわたるご指導をいただき大変ありがとうございました。

森下研究室の皆様にも研究等に関する相談をさせていただき,勉学に限らず様々な面で手助けしていただいたこと,特に Fred Ongonwou さんには研究に関して多大な協力をしていただいたこと,感謝申し上げます。

参考文献

[1] Toru Morishita, Anh-Thu Le, Zhangjin Chen, and C. D. Lin, Accurate Retrieval of Structural Information from Laser-Induced Photoelectron and High-Order Harmonic Spectra by Few-Cycle Laser Pulses, 2008

[2] Daniel Kidd, Cody Covington, and Kálmán Varga* Department of Physics and Astronomy, Vanderbilt University, Nashville, Tennessee 37235, USA (Received 19 September 2017; published 15 December 2017) Exponential integrators in time-dependent density-functional calculations PHYSICAL REVIEW E 96, 063307 (2017)

[3] James Schloss, Arcane Algorithm Archive, Split-Operator Method, 2023/01/12 閲覧,
https://www.algorithm-archive.org/contents/split-operator_method/split-operator_method.html

[4] 安田允匡, 二色直線偏光レーザーパルス照射による水素分子の解離性イオン化, 2021 年卒業論文

[5] Danis N. Yangaliev, Vladimir P. Krainov, and Oleg I. Tolstikhin, Quantum theory of radiation by nonstationary systems with application to high-order harmonic generation, 2020

[6] Anh-Thu Le, T. Morishita, R. R. Lucchese, and C. D. Lin, Theory of High Harmonic Generation for Probing Time-Resolved Large-Amplitude Molecular Vibrations with Ultrashort Intense Lasers, 2012

[7] 小出昭一郎, 基礎物理学選書 5A 量子力学(I)(改訂版), 裳華房, 2021/05/25 第 50 版 10 刷発行

[8] 小出昭一郎, 基礎物理学選書 5B 量子力学(II)(改訂版), 裳華房, 2020/11/15 第 40 版 2 刷発行