

氏名	小島龍弥	学籍番号	1910245
題目	スプリットオペレータ・アダムス・バッシュフォース法による時間依存シュレディンガー方程式の数値計算		
要旨	指導教員氏名	森下亨	
<p>背景</p> <p>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。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。</p> <p>目的</p> <p>本研究では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、斉次の時間依存シュレディンガー方程式を変形し、非斉次シュレディンガー方程式に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。</p> <p>方法と結果</p> <p>まず、通常の1次元調和振動子に対する斉次のシュレディンガー方程式</p> $i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} x^2 \right] \Psi(x,t) \quad (t > 0), \quad \Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \exp \left\{ -\frac{(x-X)^2}{2} \right\} \quad (1)$ <p>を考える。SO法のプログラムを用いて数値計算を行い、</p> $\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \exp \left[-\frac{\{x - X \cos(t)\}^2}{2} - i \left\{ X x \sin(t) - \frac{X^2 \sin(2t)}{4} + \frac{t}{2} \right\} \right] \quad (2)$ <p>と記される解析解と、計算解の相対誤差について調べた。大域誤差はSO法で予想される時間ステップ幅Δtの2乗に比例することを確認した。ただし、Xは波動関数の初期値から決まる値であり、ここでは$X = 0$および1とした。</p> <p>次に、式(1)において$x \rightarrow x \pm 1$とした式を</p> $i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} x^2 \right] \Psi(x,t) + \left[\pm x + \frac{1}{2} \right] \Psi(x,t) \quad (t > 0), \quad \Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \exp \left\{ -\frac{(x \pm 1 - X)^2}{2} \right\} \quad (3)$ <p>とし、式(3)の右辺第3項を非斉次項とみたてたシュレディンガー方程式を考える。また、式(3)の解析解は</p> $\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \exp \left[-\frac{\{(x \pm 1) - X \cos(t)\}^2}{2} - i \left\{ X(x \pm 1) \sin(t) - \frac{X^2 \sin(2t)}{4} + \frac{t}{2} \right\} \right] \quad (4)$ <p>となる。SO-AB法のプログラムを用いて数値計算を行い、解析解と計算解の相対誤差について調べた。ここでは$X = \pm 1$とした。SO法、AB法ともに誤差はΔtの2乗に比例することが知られており、2つを組み合わせたSO-AB法も大域誤差がΔtの2乗に比例することを確認した。</p> <p>まとめ</p> <p>SO-AB法において大域誤差はΔtに比例することを確認し、非斉次シュレディンガー方程式を解く手法の開発の準備を行った。</p> <p>参考文献</p> <p>[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</p> <p>[2] Daniel Kidd, Cody Covington, and Kálmán Varga, Exponential integrators in time-dependent density-functional calculations, 2017</p>			